



Simulación de propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Co_xFe_{100-x} (x: 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) por primeros principios

Wilson David Buitrago Ceballos

Universidad Tecnológica de Pereira
Facultad de ingenierías, Departamento de Física
Pereira-Risaralda, Colombia
2017

Simulación de propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Co_xFe_{100-x} (x: 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) por primeros principios

Wilson David Buitrago Ceballos

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de:
Ingeniero Físico

Director(a):
Dra. Beatriz Cruz Muñoz
Co-Director(a):
Dr Andres Camilo García Castro

Grupo de Investigación
En propiedades magnéticas y magnetoópticas en nuevos materiales

Universidad Tecnológica de Pereira
Facultad de Ingenierías, Ingeniería Física
Pereira-Risaralda, Colombia
2017

A Dios por regalarme salud, la oportunidad de estudiar y una gran madre que luchó, sacrificó los mejores años de su vida y sueños para hacer que lograra cumplir esta meta, que más que mía, es de ella por todo el amor y apoyo incondicional a pesar de las adversidades durante estos años, haciéndome el ser humano que soy hoy.

Agradecimientos

Agradezco por el apoyo durante el desarrollo de este proyecto al Grupo de Investigación en propiedades Magnéticas y Magnetoópticas en nuevos materiales (GIMM) por brindarme la formación, los espacios, acompañamiento y convertirse en una familia durante estos años. También quiero agradecer al Dr. Milton Medina por sus aportes en la participación de eventos en los que participo el proyecto y al Ingeniero Andrés Castillo por su colaboración en las primeras fases del proyecto con el manejo e instalación del software de calculo (SPRKKR). Quiero dar mis más grandes agradecimientos al Dr. Andrés Camilo García Castro y a la Dra. Beatriz Cruz por su apoyo personal e intelectual al momento de lograr el desarrollo y la culminación del proyecto. Agradezco al grupo de investigación Sirius de la Universidad Tecnológica de Pereira y a su director John Osorio, por facilitar el uso de las herramientas computacionales para la realización de los cálculos del proyecto al igual que al CINVESTAV. Finalmente agradezco a la Universidad Tecnológica de Pereira por su formación durante estos años con grandes maestros y espacios para el desarrollo de mi formación.

Contenido

1. Introducción	01
2. Objetivos	04
3. Antecedentes Bibliográficos	05
3.1 Propiedades precursores Co, Fe	05
3.2 Aleaciones CoFe	09
4. Marco Conceptual	14
4.1 Primeros principios	14
4.2 Ferromagnetismo	15
4.3 Constantes de Interacción	17
5 Introducción a la Teoría del Funcional de la Densidad	19
5.1 Problema de múltiples electrones	19
5.2 Teoría del funcional de la densidad	21
5.3 Teoremas de Hohenberg-Kohn	23
5.4 Ecuaciones de Kohn-Sham	25
6 Método SPR-KKR	27
6.1 Introducción método	27
6.2 Detalles de Computo	29
7 Resultados y Análisis	30
7.1 Relajación Estructural	30
7.2 Difracción de Rayos X	34
7.3 Convex-Hull	37
7.4 Momentos Magnéticos	40
7.5 Densidades de Estado	44
7.6 Constantes de Intercambio	47
7.7 Temperaturas de Curie	51
8 Conclusiones	53
9 Participación en eventos	54
10 Bibliografía	55

Indice de Figuras

1-1. Estructura BCC sistema CoFe, desordenado (izquierda) y ordenado (derecha).	2
3-1. Configuración de espín nivel 3d de energía	5
3-2. Diagrama de fase del hierro (Fe) puro.[13]	6
3-3. Configuración de espín nivel 3d de energía	7
3-4. Diagrama de fase sistema CoFe	9
3-5. Energía de formación sistema CoFe.[2]	10
3-6. DRX experimental reportada por F. Sanchez	11
3-7. DOS experimental reportada por K. Kim	12
3-8. Momentos magnéticos reportados por M.Rahaman	13
4-1. Ferromagnetismo	16
4-2. Curva de magnetización del Fe, Co y Ni	16
4-3. Curva de Bethe-Slater	17
4-4. Comportamiento magnético debido al espín	18
5-1. Caja infinitesimal centrada [24]	21
7-1. Constante de red en función del contenido de Co fase ordenada	31
7-2. Constante de red en función del contenido de Co fase desordenada	32
7-3. Constante de red vs variación contenido de Co.	33
7-4. DRX Teórica fase ordenada	34
7-5. DRX Teórica fase desordenada	35
7-6. DRX Teórica fase desordenada	36
7-7. Convex Hull fase ordenada	38
7-8. Convex Hull fase desordenada	38
7-9. Convex Hull Co_XFe_{100-X}	39
7-10.Sistema Co_XFe_{100-X}	41
7-11.Momento magnético total Co_XFe_{100-X}	43
7-12.Curva de Slater-Pauli Co_XFe_{100-X} [11]	43
7-13.DOS fase ordenada Co_XFe_{100-X}	44
7-14.DOS fase desordenada Co_XFe_{100-X}	46
7-15.Constante de interacción fase ordenada y desordenada Co_XFe_{100-X} calculada	48
7-16.Constantes de intercambio fase ordenada Co_XFe_{100-X}	49

7-17. Constantes de intercambio fase desordenada Co_xFe_{100-x}	50
7-18. Temperatura de Curie en función del contenido de Co	52

Indice de Tablas

3-1. Propiedades del Hierro	6
3-2. Propiedades del Cobalto	8
7-1. Constante de red calculada fase ordenada (Pm3m)	31
7-2. Constante de red calculada fase desordenada	32
7-3. Momentos magnéticos locales fase ordenada	40
7-4. Momentos magnéticos locales fase desordenada	41
7-5. Momentos magnético total Co_XFe_{100-X}	42
7-6. Constantes de intercambio Co_XFe_{100-X}	47
7-7. Temperatura de Curie sistema Co_XFe_{100-X}	51

1 Introducción

La física del estado sólido es una de las líneas de la física moderna que más impacto tiene, debido a su éxito en la predicción en el comportamiento de materiales semiconductores, metálicos, aislantes y la creación de nuevos materiales con propiedades físicas únicas. Para predecir el comportamiento de algún material, se recurren a métodos de aproximación, ya que cuando se enfrenta un problema de múltiples electrones, se llega a un problema que no es analítico, por lo que se ha recurrido a herramientas y teorías como la DFT para la predicción por primeros principios de propiedades magnéticas, eléctricas, estructurales, mecánicas de los materiales.

El estudio de las aleaciones CoFe por primeros principios, representan un factor determinante para el desarrollo de la industria de grabación magnética, aeronáutica e instrumentación, debido a sus propiedades magnéticas. Estructuralmente se entiende la aleación CoFe como un intermetálico que presenta transiciones orden-desorden en el cual el Fe ocupa las posiciones $(0\ 0\ 0)$ y el Co ocupa las posiciones $(1/2\ 1/2\ 1/2)$ de la estructura BCC, donde para la estructura ordenada presenta una estructura tipo CsCl (B2) o simetría $Pm\bar{3}m$ y para la estructura desordenada BCC simetría $Im\bar{3}m$. [1]

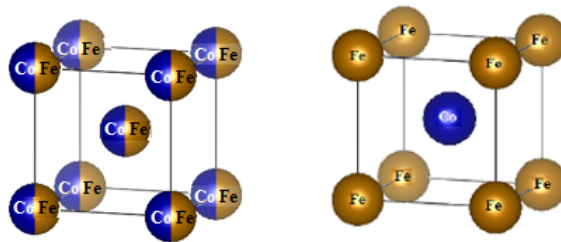


Figura 1-1: Estructura BCC sistema CoFe, desordenado (izquierda) y ordenado (derecha).

El sistema CoFe es una de las aleaciones magnéticamente blandas más interesante debido a su bajo costo y a que presentan los más altos valores de magnetización de saturación, altas temperatura de Curie y bajos campos coercitivos entre todas las aleaciones magnéticas y tierras raras comerciales, con valores reportados para la magnetización de saturación de (225 emu/g) y temperatura de Curie de (1120 K) , haciendo que sea muy atractiva por sus propiedades magnéticas.[2]

Se han realizado múltiples estudios experimentales por aleación mecánica, técnicas de sol-gel, electrodeposición, PLD, entre otras, donde se ha evidenciado variaciones en las propiedades magnéticas y estructurales del sistema CoFe debido al proceso de obtención de la aleación, por lo que se hace necesario el estudio por primeros principios del sistema CoFe para confirmar o descartar las hipótesis propuestas en algunos estudios experimentales del porque las variaciones de las propiedades magnéticas y estructurales.

En este proyecto se empleo el paquete SPRKKR para determinar por primeros principios las propiedades en estado fundamental del sistema Co_xFe_{100-x} como función de la composición de Co ($x = 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100$) % at donde el código soluciona la ecuación de Dirac a partir del método de campos auto-consistentes y el método KKR.

A partir de los cálculos realizados por primeros principios se determinaron las constantes de red para la fase ordenada y la fase desordenada, encontrando una variación del 2% en la constante de red de ambas fases.

Se determino la estabilidad del sistema Co_xFe_{100-x} , estableciendo así en que contenidos, cual de las dos fases estudiadas (ordenada - desordenada) presenta la mejor respuesta magnética, donde a partir del potencial calculado por primeros principios se determino las propiedades estructurales, como las densidades de estado, convex hull, constantes de red y magnéticas como los momentos magnéticos, temperaturas de Curie y constantes de interacción.

Los resultados obtenidos por primeros principios del sistema Co_xFe_{100-x} se compararon con resultados experimentales, donde se encontró que los resultados obtenidos son muy cercanos con los reportados en la literatura.

Se descarto a partir de los resultados obtenidos, algunas de las hipótesis planteadas experimentalmente, tal como la explicación de la variación de las propiedades magnéticas (temperaturas de Curie, momentos magnéticos, constantes de interacción) del sistema Co_xFe_{100-x} , donde se reporta que las variaciones en las propiedades magnéticas se deben principalmente a los métodos de obtención de aleado, y no a las interacciones entre los precursores dentro de la red, como se evidencia en los cálculos obtenidos en el presente estudio .

2 Objetivos

Objetivo General

Calcular e identificar por primeros principios las propiedades magnéticas (constantes de intercambio, momentos magnéticos, Temperaturas de Curie) y estructurales (Constantes de red, Convex-Hull, DRX, DOS) de la aleación Co_XFe_{100-X} ($X=0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100$) at % como función de la composición de Co y establecer mediante el análisis teórico que contenidos de Co para la fase ordenada y desordenada se presenta la mayor estabilidad y la mejor respuesta magnética en términos de las variables calculadas.

Objetivos Específicos

* Calcular las propiedades estructurales (Constantes de red, Convex Hull, DOS, DRX) y propiedades magnéticas (Momentos magnéticos, Constantes de intercambio, Temperatura de Curie) de las fases ordenada y desordenada.

* Determinar que Contenido de Co y que fase presenta la mejor respuesta magnética, en términos de las variables calculadas, caracterizando así las propiedades del sistema Co_XFe_{100-X} para cada una de sus posibles aplicaciones

* Descartar y establecer hipótesis del comportamiento del sistema Co_XFe_{100-X} reportados en la literatura, para así darle respuesta a algunos comportamientos reportados que no han podido ser explicados.

3 Antecedentes Bibliográficos

3.1. Propiedades precursores Co, Fe

Características y propiedades del hierro (Fe)

El Hierro (Fe) es uno de los elementos más abundante en la naturaleza, además de ser uno de los materiales magnéticos que mas bajo costo presenta comercialmente. El hierro se encuentra entre los llamados metales de transición, y es de gran interés debido a sus propiedades ya que es un buen material ferromagnético a temperatura ambiente y a 1 atmósfera [4], además de presentar una dureza de 4 y 5, lo que hace que sea un material duro, maleable, dúctil, a pesar de ser difícil de magnetizar en caliente.

A 790 C el hierro pierde sus propiedades magnéticas, convirtiéndose en un material anti-ferromagnético; sus propiedades magnéticas se debe a los estados libres presentes en su ultimo nivel de energía (nivel d), como se puede observar en su configuración electrónica [Ar] $3d^6 4s^2$.



Figura 3-1: Configuración de espín nivel 3d de energía

Siguiendo las reglas de Hund, se observa en la figura 3-1 que el hierro presenta cuatro estados libres o electrones desapareados en su nivel d de energía, lo que produce un momento magnético debido a las interacciones de los espines desapareados, haciendo que el hierro presente propiedades magnéticas.

También en la naturaleza se encuentran 4 formas alotrópicas del hierro ($\alpha, \beta, \delta, \epsilon$), siendo α la forma magnética del hierro con estructura cristalina BCC, la que se encuentra en la naturaleza a temperatura ambiente. Se observa en el diagrama de fase los cambios de fase presentes en el hierro, en función de la temperatura y la presión.

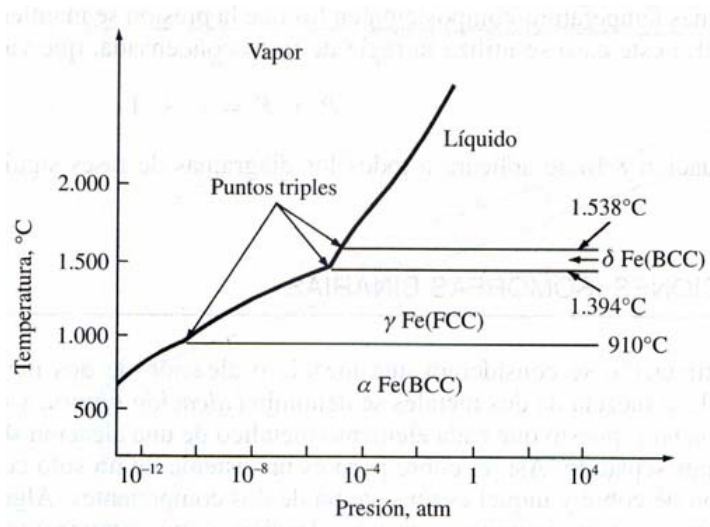


Figura 3-2: Diagrama de fase del hierro (Fe) puro.[13]

El hierro es un buen agente reductor, y dependiendo de sus condiciones puede oxidarse, así mismo puede ser utilizado para obtener aceros estructurales, en la fabricación de imanes, tinta, pigmentos pulidores y abrasivos. Algunas de las propiedades del hierro son mostrados en la tabla 3-1. [12][14]

Tabla 3-1: Propiedades del Hierro

Numero Atómico	26
Grupo	8
Periodo	4
Electronegatividad	1.8
Radio Atómico	1.26
Configuración Electrónica	$3d^6 4s^2$
Estructura Cristalina	BCC
Simetría	Im3m
Momento Magnético	$2.25 \mu_B$
Temperatura de Curie	1043 K

Características y propiedades del Cobalto (Co)

El Cobalto (Co), se encuentra dentro del grupo de los metales de transición, el cual tiene propiedades similares a la de sus vecinos (hierro y níquel), tanto en estado libre como en estado combinado. Este materia forma el 0.001 % del total de las rocas ígneas (volcánicas) de la corteza terrestre y en algunos minerales del hierro, níquel, cobre, plata, manganeso, zinc y los importantes en el comercio de los arseniuros, óxidos y sulfuros [5], lo que hace que sea costoso comercialmente, debido a los métodos de extracción.

Algunas de las propiedades del cobalto y sus aleaciones es que son resistentes al desgaste y a la corrosión aun a temperaturas elevadas, y no se ve afectado por el aire, ni por el agua.

El Cobalto en estado natural tiene una estructura cristalina HCP, el cual presenta propiedades magnéticas clasificándose como un material ferromagnético[5]. El cobalto presenta valencias variables, formando iones complejos y compuestos coloreados, lo cual es una propiedad intrínseca de todos los compuestos de transición.

Las propiedades ferromagnéticas del cobalto son debidas al numero de estados libres en su ultimo nivel de energía (nivel d), el cual tiene tres espines desapareados, provocando que no se presente apantallamiento total de los momentos magnéticos locales debido al espín, dándole así las propiedades magnéticas al cobalto, esto se puede observar en su configuración electrónica [Ar] $3d^7 4s^2$ [6].



Figura 3-3: Configuración de espín nivel 3d de energía

El Cobalto es uno de los pocos elementos mono-isotrópicos, aunque puede encontrarse que esté constituido por una mezcla de dos formas alotrópicas, una estructura HCP y otra FCC, siendo la temperatura de transición de ambas de 722 K . A pesar de que el cobalto metálico tiene poca resistencia química, es más estable que el hierro ya que mantiene sus propiedades sin degradarse en el aire y el agua.[5]

El cobalto es de gran utilidad en la industria debido a su resistencia a altas temperaturas, por lo que es utilizada en la fabricación de maquinaria, herramientas, sellos de vidrio a metal, en aleaciones dentales, en joyas y cubertería, ya que aumenta la dureza y resistencia a la oxidación. Además de sus aplicaciones el cobalto es de mucho interés en aleaciones magnéticas como la aleación Hierro-Cobalto ya que presenta muy buenas propiedades como una alta dureza, elevados puntos de fusión y ebullición, buena conductividad térmica y eléctrica

[5], así como altas temperaturas de Curie y magnetización de saturación. En la tabla 3-2 se observan algunas de las propiedades del cobalto [15].

Tabla 3-2: Propiedades del Cobalto

Numero Atómico	27
Grupo	9
Periodo	4
Electronegatividad	1.88
Radio Atómico	1.25
Configuración Electrónica	[Ar] $3d^7 4s^2$
Estructura Cristalina	HCP
Simetría	P63mmc
Momento Magnético	$3.319 \mu_B$
Temperatura de Curie	1388 K

3.2. Aleaciones CoFe

Las aleaciones CoFe son de gran interés tanto para la industria como para la investigación, debido a que presenta una de las mejores respuestas magnéticas entre todos los metales de transición comerciales. El sistema CoFe se caracteriza por tener alta magnetización de saturación, altas temperaturas de Curie, bajos campos coercitivos, alta permeabilidad [1][2][3].

Algunas de las aplicaciones mas conocidas donde se hace uso de la aleación CoFe es en la generación de partículas para materiales biomédicos, en biomedicina para la detección de tumores en resonadores magnéticos, también es usada en la construcción de los discos duros ya que gracias a sus propiedades magnéticas permite que se generen dispositivos con grandes capacidades de almacenamiento, así mismo son de gran importancia en la construcción de generadores y plantas eléctricas.[16][17].

Las aleaciones CoFe presentan transiciones orden-desorden, donde aproximadamente a 1000 K presenta la transición a la fase desordenada y aproximadamente a 1230 K sufre una transformación de fase, pasando de una estructura bcc a fcc[16] . Se puede observar en la figura 3-4 el diagrama de fase del sistema CoFe.[20]

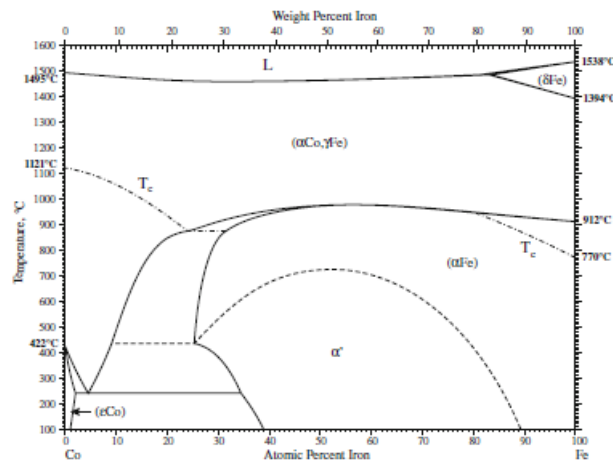


Figura 3-4: Diagrama de fase sistema CoFe

El sistema FeCo, presenta una estructura cristalina tipo BCC, donde para el sistema ordenada presenta una estructura tipo CsCl (B2) o simetría Pm3m y para la estructura desordenada una simetría Im3m. La cinética en las reacciones de ordenamiento es comúnmente descrita en términos de evolución del parámetro de largo alcance. Para aleaciones por el método de aleado mecánico se reporta que para porcentajes atómicos no mayores del 50 % at de cobalto, el desorden atómico no se debe a una interdifusión de un elemento en otro, si no a la interdifusión de ambos átomos, formando una red que se fractura continuamente.[19]

Múltiples estudios experimentales realizados en aleaciones CoFe por métodos de aleado mecánico, técnicas de Sol-gel, electro-deposición, PLD, han mostrado variaciones en las propiedades estructurales y magnéticas del sistema CoFe, las cuales normalmente son asociadas al método de obtención de la aleación, debido al estrés o las imperfecciones generadas [16][4][6]. De igual forma, estudios realizados por primeros principios muestran el comportamiento del sistema CoFe, donde se observa claramente los efectos debido a las interacciones interacciones presentes en el material, y no en los efectos producidos por perturbaciones externas, como los estudios por primeros principios realizados por M. Mizuno[2] y M. Lezaic [5].

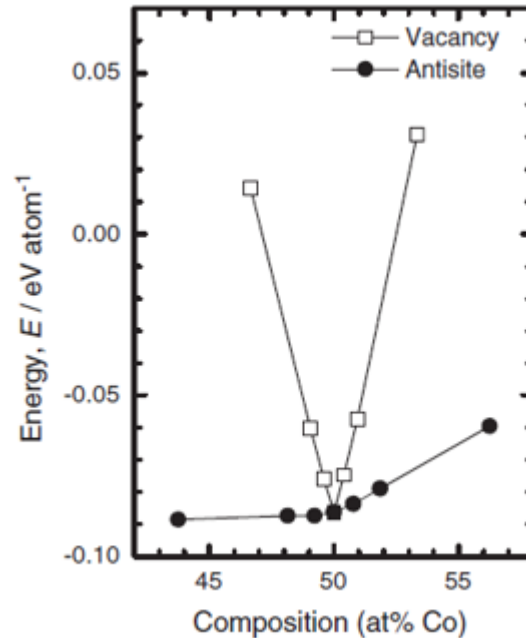


Figura 3-5: Energía de formación sistema CoFe.[2]

Mizuno y M. Araki [2], calcularon por primeros principios la estabilidad y la formación de la aleación del sistema CoFe, en donde emplearon el paquete de simulación VASP, donde determinaron un valor de 2.856 Å para $Co_{50}Fe_{50}$, siendo este valor muy cercano a valores reportados experimentalmente de 2.852 Å; para esto Mizuno calculo la constante de red con un corte de energía cinética de 350 eV y 4090 puntos K sobre la red, en donde determino también la estabilidad de los defectos constitucionales del sistema, como se observa en la figura 3-5, donde el tipo de defecto mas estable fue para los defectos antisite como se esperaba, debido a la similitud de los radios atómicos del Co y el Fe.

La variación en las constantes de red reportadas por T.Sourmail [4] son de 2.849 a 2.851 Å, el cuál asocia su variación a el ordenamiento del sistema, que es representado por el parámetro de ordenamiento S. Adicional a eso T.Sourmail reporta una variación del 0.2% en la constante de red entre las dos fases (ordenada y desordena).

F. Sanchez [3] calculo las constantes de red y la difracción de rayos x de la aleación CoFe variando la composición de Co por aleamiento mecánico, donde encontró la formación de la solución solida BCC en contenidos menores a 60 at% Co y una mezcla de fases para composiciones superiores al 70 at% Co, donde reporto constantes de red de 2.86 Å, 2.85 y 2.88 Å para $Co_{10}Fe_{90}$, $Co_{50}Fe_{50}$, $Co_{70}Fe_{30}$ respectivamente en la fase desordenada.

F. Sanchez, reporta que el corrimiento reportado en la prueba de DRX hacia la derecha mostrado en la figura 3-6, se debe a las microtensiones generadas durante el método de aleado, y que el corrimiento en el pico principal no se debe a la diferencia de radios atómicos del Co y Fe ya que ambos presentan radios atómicos similares.

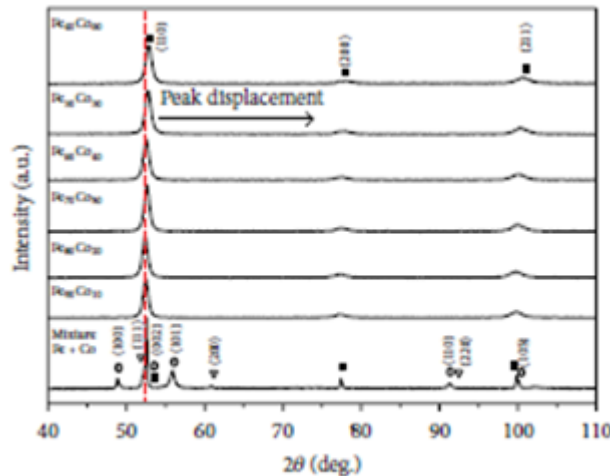


Figura 3-6: DRX experimental reportada por F. Sanchez

K.Kim y S. Lee [1], encontraron que el sistema CoFe es estable en concentraciones inferiores al 70 at % Co y que la estructura ordenada presenta estabilidad hasta 50 at % Co. K.Kim reporta también que para la configuración de estados en espín down es mas contributivo los aportes debido a que los orbitales del Co son mas electronegativos y se espera que este localizado en bajas energías a diferencia del Fe; en la figura 3-7 se observa la DOS reportada para $Co_{50}Fe_{50}$ [1].

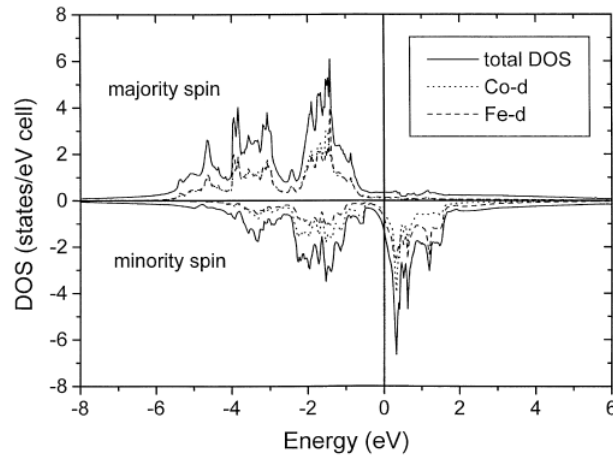


Figura 3-7: DOS experimental reportada por K. Kim

Se encontró el mismo comportamiento reportado por K.Kim en los resultados mostrados en el estudio por primeros principios estudiado por M.Rahaman [6], donde reporta que el llenado completo de la banda d de espín up en el Co es inerte, lo que hace que la energía se desplace hacia la banda d down, la cual tiene energías mas cercanas a las de valencia.

Estudios de las propiedades magnéticas es reportado también por M. Rahaman, donde encontró un incremento de los momentos magnéticos del Fe con el incremento del contenido del Co pasando de $2.2 \mu_B$ a $2.62 \mu_B$, donde los momentos locales del Co permanecen casi constantes, variando solo en $0.5 \mu_B$ en toda la composición, conduciendo a una redistribución de los electrones haciendo que la energía del sistema lo convierta en un material fuertemente ferromagnético.

En la figura 3-8 se observan los momentos magnéticos netos y locales calculados por M.Rahaman.[3], donde en la figura superior encontró un crecimiento de los momentos magnéticos netos hasta el 30 at % Co, que asocia a la interacción debida a los dominios magnéticos en el sistema CoFe. En la figura inferior M.Rahaman reporta un crecimiento notable de los momentos magnéticos locales del Fe y un comportamiento casi constante de los momentos magnéticos locales del Co con el incremento de contenido de Co.

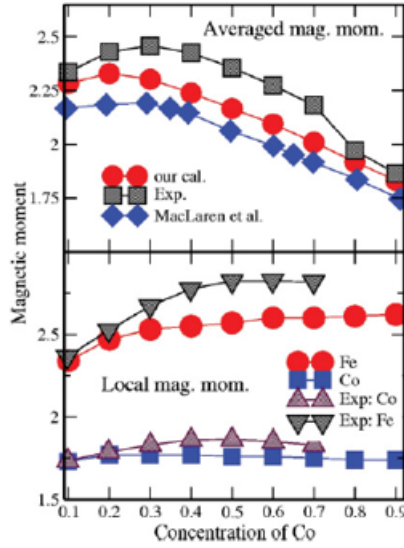


Figura 3-8: Momentos magnéticos reportados por M.Rahaman

T.Sourmail [4] reporta por aleamiento mecánico una variación de los momentos magnéticos locales del Fe de $2.2 \mu_B$ a $3 \mu_B$, siendo un poco mas alto que el reportado por M.Rahaman[3], donde el incremento lo asocian a las perturbaciones ocasionadas por las dislocaciones causadas durante el proceso de aleado.

A partir del Hamiltoniano de Heisenberg M. Lezaic [3] estudio el comportamiento magnético del sistema CoFe, donde determino la temperatura de Curie del sistema por medio del método de monte carlo, para el cual obtuvo valores mas altos de T_C de 1640 K y 1400 K, adicional a esto, encontro un incremento en los momentos magnéticos del Co de $2.2 \mu_B$ a $2.6 \mu_B$.

M. Lezaic encontró una fuerte dependencia de los primeros vecinos del sistema CoFe con el parámetro de red a bajas concentraciones de Co, y una dependencia mucho menor para altos contenidos de Co. Introduciendo el coeficiente J_0 correspondiente al primer vecino o al costo de la banda de energía para voltear el momento magnético de un solo átomo, se puede calcular el el campo medio de la temperatura de Curie por medio de $k_B T_C M_F = 2J_0/3$. [3]

A. Jakobsson [18] reporta que en aleaciones CoFe, la constante de intercambio decrece con rapidez con el incremento de la constante de red, lo cual tiene un efecto significativo en la T_C , reportando una temperatura de curie de 1480 K.

4 Marco Conceptual

4.1. Primeros principios

Se conoce como primeros principios a todos los métodos de computación a alta precisión que permiten describir la interacción entre constituyentes de la materia, las cuales están fundamentadas en las leyes de la naturaleza, concretamente en mecánica cuántica, ya que en los límites clásicos de la mecánica y el electromagnetismo se carece de predicción cuando queremos estudiar un sistema a escala atómica. En un cálculo ideal por primeros principios los parámetros necesarios para resolver un problema por ab-initio sería el número de átomos en la celda de simulación, junto con los datos cristalográficos, por lo que es necesario conocer la función de onda que describe al sistema, el cual viene dado ya sea por la ecuación de Schrödinger o Dirac.[21]

Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4-1)$$

Para el estudio o diseño de nuevos materiales, se deben implementar experimentos que muestren el comportamiento del material o sistema a estudiar para determinar sus propiedades; de igual forma es necesario recurrir a teorías que expliquen el comportamiento de los materiales y pueda predecir el comportamiento también para materiales similares.

Algunas teorías basadas solamente en los tipos de átomos en el material y sus interacciones, no son suficientes para poder predecir el comportamiento de algún sistema atómico, por lo que se debe hacer uso de teorías como la mecánica cuántica y la mecánica estadística, para predecir las propiedades del material que se estudie, denominando el uso de estas teorías para el cálculo de sus propiedades como primeros principios o métodos ab initio.

Los métodos ab initio carecen de parámetros ajustables a datos experimentales, y tienen carácter predictivo, es decir, sirven no solo para reproducir resultados experimentales sino para predecir los mismos. Gracias a los grandes avances que se han producido últimamente en el campo de la computación, estos métodos de primeros principios se han podido aplicar al estudio de sólidos complejos.[27]

4.2. Ferromagnetismo

El ferromagnetismo es el fenómeno físico que presentan algunos materiales, en donde sin presencia de un campo magnético externo presentan un campo magnético propio debido al ordenamiento magnético causado por sus momentos magnéticos locales que apuntan hacia una misma dirección, dándole las propiedades ferromagnéticas al material.

Al ser sometido material ferromagnético a un campo magnético externo, los dominios magnéticos del material tienden a alinearse con el campo externo, haciendo que los dominios en los que los dipolos que están orientados en el mismo sentido y dirección del campo magnético externo aumenten su tamaño. El incremento de los momentos magnéticos se debe a las características de las paredes de Bloch, los cuales avanzan en dirección a los dominios magnéticos, donde la dirección de los dipolos magnéticos no coinciden, dando lugar a un monodominio, donde al eliminar el campo magnético externo, el dominio permanece y solo se ve afectado en el tiempo o con incrementos de la temperatura.

Se puede entender de otra forma el fenómeno del ferromagnetismo como el campo producido por los efectos cuánticos de intercambio de energía entre electrones, lo que lleva a que se produzca un alineamiento de los momentos magnéticos locales del material hacia una misma dirección, siguiendo las reglas de Hund, se establece que los espines paralelos son los que tienen menos energía.

Se observa en la figura 4-1 el comportamiento de los dominios magnéticos cuando se le aplica un campo magnético externo al material. En la figura de la izquierda se aprecia, que antes de aplicar el campo magnético externo, todos los momentos magnéticos se encuentran alineados dentro de cada dominio, pero a su vez cada dominio tiene sus estados configurados de forma aleatoria.

Cuando se aplica el campo magnético externo, como se observa en la figura del medio, todos los momentos magnéticos de cada dominio empiezan a alinearse, hasta llegar al comportamiento mostrado en la figura derecha, donde todos los momentos magnéticos se encuentran apuntando hacia una misma dirección, produciendo así ferromagnetismo en el material.

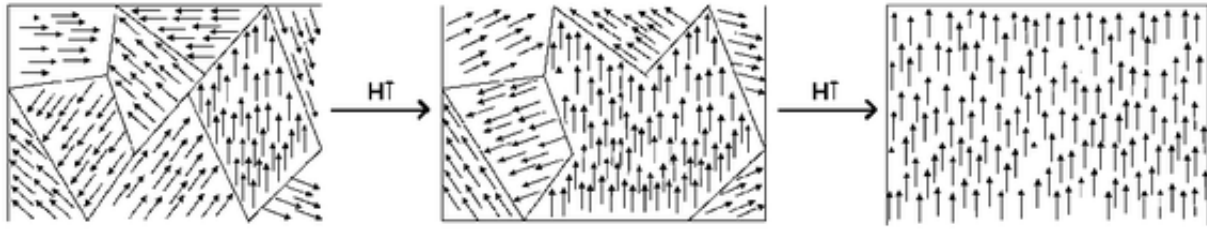


Figura 4-1: Ferromagnetismo

Los materiales ferromagneticos a pesar de mantener su magnetización, esta tiende a perderse en el tiempo o a ciertas temperaturas, la cual se conoce como temperatura de Curie. Si un material se encuentra por debajo de esta temperatura, el campo molecular producido va a tener una magnitud de magnetización limite, la cual es conocida como magnetización de saturación, donde independientemente del campo externo aplicado, el material va a llegar a un punto tal en que su magnetización no se incrementa mas. En la figura 4-2 se puede apreciar la curva de magnetización del Fe, Co y Ni- [11], donde se evidencia que el hierro y el cobalto presentan los valores mas altos de magnetización de $1714 \mu_B$ y $1422 \mu_B$.

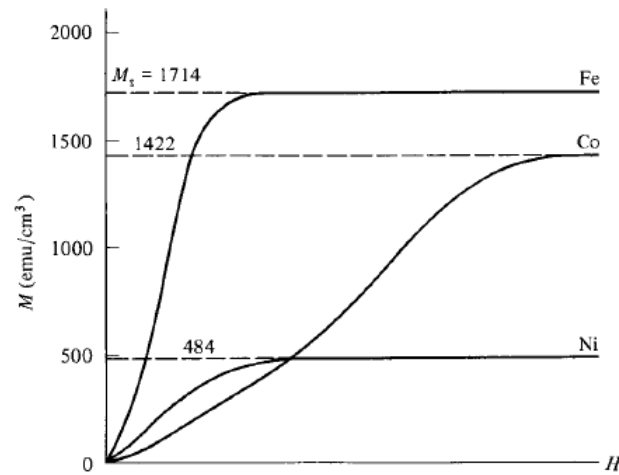


Figura 4-2: Curva de magnetización del Fe, Co y Ni

4.3. Constantes de interacción

Las constantes de intercambio son un efecto descrito por la mecánica cuántica, la cual ocurre entre electrones que se encuentran desapareados, cuando se solapan las funciones de onda de sus átomos mas cercanos. El valor de las constantes de intercambio dependen de la simetría de sus orbitales, de la distribución del espacio y la orientación de los espines.[22]

Se entiende la constante de interacción como un efecto cuántico del principio de exclusión de Pauli, ya que indica el comportamiento de repulsión y atracción entre átomos y moléculas, impidiendo que la materia colapse.[23] Puede observarse que dentro de los límites clásicos no podía ser explicado el comportamiento magnético de algunos materiales, debido a que clásicamente solo se consideran las interacciones Coulombicas, debido a las fuerzas de repulsión electrón-electrón y núcleo-núcleo, así como las de atracción núcleo-electrón.

Al no considerar el principio de exclusión de Pauli la teoría clásica, no se consideraba que dos electrones podían ocupar un mismo nivel de energía, donde su variación de energía se ve reflejada en su momento angular debido al espín, efecto que fue notorio en el experimento de Stern-Gerlach, mostrando que era necesaria una nueva teoría que explicara el comportamiento magnético de la materia, con lo que nació la teoría del espín.[11].

En la figura 4-3 se observa el comportamiento de la constante de interacción del Mn, Fe, Co y Ni, donde se aprecia que para valores positivos de la constante de interacción se presenta ferromagnetismo, encontrando este comportamiento para el hierro, cobalto y níquel. Para valores negativos de la constante de interacción se observa en la figura 4-3 que se presenta el fenómeno del antiferromagnetismo, encontrando que el manganeso presenta este comportamiento.

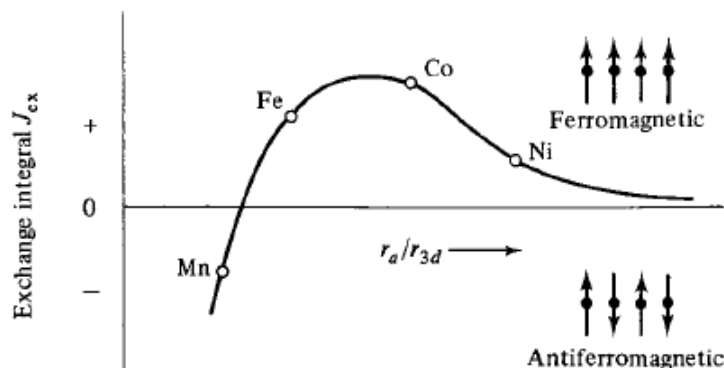


Figura 4-3: Curva de Bethe-Slater

La energía de intercambio, la cual es descrita a partir de la constante de interacción surgió al considerar dentro de la mecánica cuántica que algunas partículas son indistinguibles, donde son clasificados como fermiones, en la cual los electrones hacen parte de esta familia de partículas, lo cual indica que si hay un cambio de posición entre dos electrones y espines en general, se presenta un cambio de signo, el cual evaluando dentro de la función de onda, esta permanece idéntica, evaluando de esta forma el tratamiento cuántico del sistema dentro de la estadística de Fermi-Dirac. [22]

Haciendo uso de la mecánica cuántica para reproducir los valores de energía que describen los efectos de intercambio son descritos a través del operador Hamiltoniano, donde históricamente el primer modelo utilizado para calcular los efectos de intercambio fue el Hamiltoniano de Ising, seguido del Hamiltoniano de Heisenberg, el cual es una generalización del Hamiltoniano de Heisenberg, ya que no limita la dirección hacia la que apunta el espín, como en el caso de Ising.

$$H = -\sum J_{ij} \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2$$

En la figura 4-4 (a), se observan los dos estados de espín y sus posibles configuraciones, paralelo o antiparalelo. En la figura 4.4 (b) se aprecia las configuraciones de espín que hacen que un sistema magnético presente ferromagnetismo, que es cuando hay espines en dirección paralela o antiferromagnetismo cuando los espines se encuentran configurados en dirección antiparalela.[21]

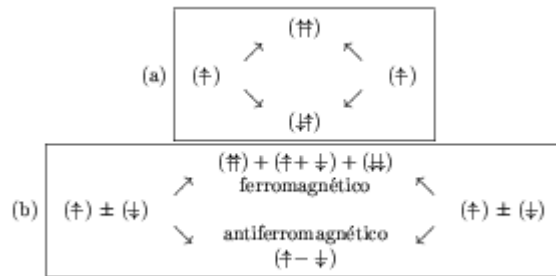


Figura 4-4: Comportamiento magnético debido al espín

5 Introducción a la Teoría del Funcional de la Densidad

5.1. Problema de múltiples electrones

Dentro de la mecánica cuántica es posible describir el comportamiento analítico de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrogeno o para el átomo Hidrogenoide, debido a que su función de onda es descrita a partir de tres coordenadas $\psi(r, \theta, \phi)$, la cual puede ser resuelta analíticamente por separación de variables y con ayuda de los polinomios de Legendre y Lager, obteniendo una ecuación radial, y otra angular llamada armónicos esféricos, las cuales describen el sistema.

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5-1)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(\frac{Q}{r} - E \right) R(r) = l(l+1) R(r) \quad (5-2)$$

$$\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} + l(l+1) Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (5-3)$$

$$Y(\theta, \varphi) = A_l^m e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \quad (5-4)$$

Cuando se tiene un problema mayor como un sistema de dos electrones, la solución a la ecuación de Schrödinger sigue teniendo una solución analítica, aunque se hace necesario recurrir a algunos métodos que ayuden a simplificar el sistema, ya que para el sistema tenemos $3N$ grados de libertad, donde N indica el numero de partículas del sistema, por lo que para el problema de 2 electrones se tienen 6 grados de libertad.

$$\varphi = f(r_1, \theta_1, \phi_1, r_2, \theta_2, \phi_2) \quad (5-5)$$

Como se observa en la ecuación 5-5, el sistema depende de 6 variables, por lo que ya no es posible hacer separación de variables para la solución al problema, la ecuación 5-7 expresa que el sistema ya depende también de las interacciones electrón-electrón.

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}(\nabla)_1^2 - \frac{1}{2}(\nabla)_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (5-6)$$

$$r_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} \quad (5-7)$$

En la solución para sistemas con dos electrones son utilizados algunos métodos, los cuales ayudan a la solución del problema, para esto recurrimos al primer método llamado teoría de perturbaciones, el cual consiste en dividir el Hamiltoniano en dos, en un Hamiltoniano perturbado de orden 1 que corresponde a la perturbación debida a la interacción electrón-electrón y en otro Hamiltoniano no perturbado de orden cero, el cual corresponde al hidrogenoide, en donde se obtiene un valor de -108.8 eV para el átomo de Helio, pero la energía medida experimentalmente es de -79.01 eV, presentando un error del 38 %, por lo que se hace necesario construir un nuevo Hamiltoniano, pero en este caso al tener en cuenta la perturbación, se busca una solución en términos de armónicos esféricos y así se repite el proceso hasta obtener un error que no sea significativo, por lo que implementarlo es computacionalmente costoso. [24]

Esto mismo ocurre con el método variacional y el método de campos auto-consistentes de Hartree que a pesar de acercarse al resultado experimental presentaba inconsistencias ya que no consideraba que los electrones son indistinguibles, ni al espín del electrón. Este problema fue resuelto por Slater, el cual represento la función de onda por medio de un determinante, en el cual considero las interacciones espín-orbita y la naturaleza de los electrones, cumpliendo así con el principio de exclusión de Pauli.

5.2. Teoría del funcional de la densidad

Debido a la ineficiencia y al gran costo computacional que representan los métodos de solución para sistemas de N partículas, ya que el número de $3N$ grados de libertad hace que sea imposible la solución de estos sistemas, por lo que se hizo necesaria la búsqueda de un método el cual lograra una eficiencia computacional y diera una buena aproximación del sistema.

Partiendo de la interpretación probabilista de la de la mecánica cuántica, en donde se consideran las partículas deslocalizadas, hasta antes de hacer una medida sobre su posición, se toma este planteamiento para formular la DFT, en donde se considera la densidad de probabilidad del sistema de localizar los electrones en una región infinitesimal del espacio, en donde x se encuentra en el espacio $x+dx$, y en el espacio $y+dy$ y z en el espacio $z+dz$, como se observa en la figura 5-1.[24]

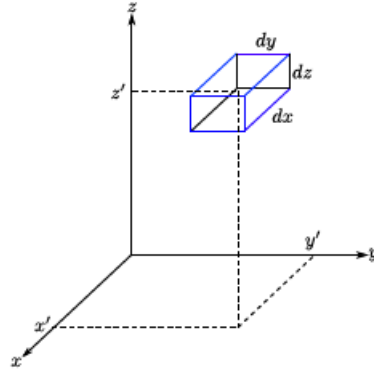


Figura 5-1: Caja infinitesimal centrada [24]

$$\rho = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty |\varphi(x^2, y^2, z^2)| \cdot dx dy dz \quad (5-8)$$

Generalizando a un sistema de N partículas, se debe cumplir que la probabilidad de encontrar cualquiera de las N partículas en un tiempo t dentro del volumen infinitesimal es el mismo y debe cumplir la condición de normalización, por lo que si se toma un sistema de $2N$ partículas se tiene el mismo comportamiento, por lo que puede ser tomado de forma natural el espín del electrón.

Para poder obtener las densidades de probabilidad por separado de cada uno de los estados del espín (up y down), es necesario considerar la siguiente expresión.

$$\sum_{m_{s1}} \dots \sum_{m_{sN}} |\psi|^2 dx_1 dy_1 dz_1 \dots dx_N dy_N dz_N \quad (5-9)$$

Si se desea calcular la probabilidad para todas las posibles situaciones, lo que se hace es intercambiar las posiciones de los electrones, donde cabe notar que al ser cuadrada la densidad de probabilidad, independientemente de que se cambie de posición, el signo de la función de onda nunca va a cambiar, por lo que en este método es evidente que se están considerando los problemas en el teorema de hartree, considerando el espín del electrón y teniendo en cuenta que los electrones son partículas indistinguibles.

La DFT permite definir la probabilidad de encontrar un electrón o de N electrones en un punto (x, y, z), por lo que ya no es de interés saber cual electrón esta en un punto del espacio, sino que ya se puede considerar cualquiera de ellos, ya que se tiene en cuenta es la densidad de probabilidad de que se encuentre uno o N en una región del espacio y el resultado debe ser el mismo debido a la naturaleza de los electrones, por lo que de una forma compacta se puede escribir la densidad de probabilidad como se muestra en la ecuación 5-10.

$$\rho(r) = N \int \dots \int \|\Psi(x, x_2, \dots, x_N)\|_2^2 \cdot dx_2 dx_3 \dots dx_N \quad (5-10)$$

Finalmente puede ser expresada la densidad como una función que toma valores no negativos y que depende de solo tres variables (x,y,z), la cual integra el numero total de electrones [24], lo cual puede ser expresado como se muestra en la ecuación 5-11.

$$\int \rho(r) \cdot dr = N \quad (5-11)$$

Es de interés notar que al no considerar una función de onda de N electrones, sino una densidad de probabilidad como objeto variacional[24], los cálculos hechos a pesar de ser menos exactos, tienen un costo computacional mucho mas bajo. Los teoremas en los que se basa la DFT establecen que se puede obtener la energía y la densidad de probabilidad exacta

del sistema en estado fundamental, cuando este es sometido a un potencial externo, donde la energía de Hartree se expresa en términos de las energías de interacción como se observa en la ecuación 5-12.

$$E_{HF} = E_{core} + E_{nuc} + E_{Cout} + E_{inter} \quad (5-12)$$

Donde:

E_{core} = Energía de un solo electrón con los núcleos.

E_{nuc} = Repulsión entre núcleos

E_{Cout} = Energía de repulsión entre los electrones

E_{inter} = Correlación del espín.

Dentro de la DFT la energía de intercambio y correlación son las únicas que dependen de la densidad electrónica, por lo que la ecuación 5-12 puede ser escrita como se muestra a continuación.

$$E_{HF} = E_{core} + E_{nuc} + E_{Cout} + EXC_{\rho} \quad (5-13)$$

5.3. Teoremas de Hohenberg-Kohn

Teorema 1

Este teorema establece que para sistemas con estados no degenerados, la energía del estado fundamental, la función de onda y todas sus propiedades electrónicas se determinan a partir de la densidad electrónica en estado fundamental; y que la energía en estado fundamental es determinada por una densidad del estado fundamental como se expresa en la siguiente expresión.

$$E_0 = F[\rho_{core}] = E[\rho_0] \quad (5-14)$$

El problema con este teorema es que solo establece que existe un funcional F , mas no da información de como calcularla, lo que hace que este sea uno de los principales problemas de la DFT [24]. Donde podemos establecer finalmente que a partir de la densidad electrónica se puede determinar a partir de un funcional aproximado, las propiedades del sistema en estado fundamental.

Finalmente este primer teorema afirma que los potenciales externos con el que interactua el sistema, también es función de la densidad electrónica en estado fundamental.

$$E_0 = E_v[\rho_0] \tag{5-15}$$

Teorema 2

Este teorema establece que si se perturba el sistema con una densidad electrónica de prueba, esto arrojará una energía mayor o igual a la energía en estado fundamental. En cálculos por primeros principios, cuando se estudian moléculas, al someter el sistema a una densidad ficticia, esta nos da por resultado un potencial debido a los núcleos, el cual es conocido como potencial externo.

$$E_0[\rho_0] \leq E_v[\rho_t] \tag{5-16}$$

Donde:

ρ_t = Densidad de Prueba

$E_0[\rho_0]$ = Energía en estado fundamental

Finalmente se establece gracias a este teorema, que si se utiliza una densidad ficticia que satisfaga la ecuación 5-11, siempre se obtendrá una energía mayor o igual al valor de la energía real en estado base.

5.4. Ecuaciones de Kohn-Sham

Las ecuaciones de Kohn-Sham parten de tomar un sistema de referencia ficticio no interactuante de N electrones, la cual experimenta una misma energía potencial $v_s(r_i)$, en donde se debe encontrar un potencial que determine a partir de la densidad ficticia generada una densidad que sea equivalente a la densidad electrónica en estado fundamental.

$$\rho_s(r) = \rho_0(r) \quad (5-17)$$

Kohn Sham presentaron un método de aproximación para la función universal $F[\rho]$, en donde el sistema es representado a partir de los determinantes de Slater, en donde se representan cada uno de los electrones del sistema, para lo que se calcula individualmente la energía cinética del sistema y la densidad electrónica como la suma de las densidades orbitales, donde a partir del Teorema 1, se establece que la energía en estado fundamental se puede expresar como

$$E_0 = E_0[\rho_0] = \langle T[\rho_0] \rangle + \langle V_{Ne}[\rho_0] \rangle + \langle V_{ee}[\rho_0] \rangle \quad (5-18)$$

Donde V_{Ne} se obtiene como

$$\langle V_{Ne} \rangle = \int \rho_0(r) v(r) dr \quad (5-19)$$

Por lo que la energía en estado fundamental del sistema es

$$E_0 = \int \rho_0(r) v(r) dr + \langle T[\rho_0] \rangle + \langle V_{ee}[\rho_0] \rangle \quad (5-20)$$

Para obtener $\langle T[\rho_0] \rangle$ y $\langle V_{ee}[\rho_0] \rangle$ Kohn-Sham partió de un sistema ficticio de electrones no interactuantes, por lo que se definieron los siguientes términos [24]:

$$\Delta < T[\rho_0] > = < T[\rho_0] > - < T_s[\rho_0] > \quad (5-21)$$

$$\Delta < V_{ee}[\rho_0] > = < V_{ee}[\rho_0] > - \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho_0(r_1)\rho_0(r_2)}{r_{12}} dr_1 dr_2 \quad (5-22)$$

Donde finalmente se determino que la energía de intercambio y correlación puede ser escrita como $E_{XC}[\rho_0] = \Delta < T[\rho_0] > + \Delta < V_{ee}[\rho_0] >$, por lo que la energía en estado fundamental se expresa

$$E_0 = \int \rho_0(r)v(r)dr + < T_s[\rho_0] > + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho_0(r_1)\rho_0(r_2)}{r_{12}} dr_1 dr_2 + E_{XC}[\rho_0] \quad (5-23)$$

6 Método SPR-KKR

6.1. Introducción método

Este paquete permite calcular la estructura electrónica de un sistema periódico tridimensional, incluyendo sistemas con desorden magnético. La estructura electrónica puede ser calculada en tres modos disponibles llamados full relativistic, relativistic y scalar-relativistic. Donde cada uno de estos modelos permite calcular diferentes tipos de propiedades electrónicas.

Este paquete de calculo es basado en el formalismo del método KKR y la función de Green, donde toda la información de la estructura electrónica de un sistema no es expresado en términos de ondas de Bloch si no por valores propios correspondientes del la función de Green, la cual esta basada en la ecuación de Dirac para un sistema polarizado como se muestra a continuación

$$[\frac{\hbar}{i}c\alpha\nabla + \beta mc^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) + \beta\vartheta.\mathbf{B}_{eff}\mathbf{r}]\Psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\Psi_i(\mathbf{r}) \quad (6-1)$$

$$\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_{ext}(\mathbf{r}) + \frac{\partial E_{XC}[n, \mathbf{m}]}{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})} \quad (6-2)$$

La dependencia del espín con el potencial es construido con la version relativista de de la SDFT, donde se soluciona la ecuación de Dirac para cada tipo de átomo; en principio el campo magnético efectivo \mathbf{B}_{eff} puede ser direccionado hacia cualquier dirección, sin embargo los cálculos son simplificados para $\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{B}_{eff}\mathbf{e}_z$. [25]

La ecuación de Dirac es resuelta a partir de la siguiente función de onda propuesta:

$$\psi_v = \Sigma \psi \forall v \quad (6-3)$$

Donde se obtienen dos ecuaciones diferenciales radiales:

$$\psi_v = \Sigma \psi \forall v \quad (6-4)$$

Donde basado en la siguiente identidad puede ser obtenida la energía del sistema para cada estado $|\alpha\rangle$, la cual calcula algunas propiedades electrónicas y espectroscópicas.

$$\zeta G(E) = -\pi \Sigma_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| \delta(E - E_\alpha) \quad (6-5)$$

Algunas de las propiedades electronicas que pueden ser determinadas a partir de la ecuación 6-1 y 6-6 son la densidad de carga ecuación 6-7, magnetización 6-8 y los momentos magnéticos orbital y de espín, ecuaciones 6-8 y 6-9 respectivamente.

$$n(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi} \zeta \text{Trace} \int^{E_F} dE G(r, r, E) \quad (6-6)$$

$$m(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi} \zeta \text{Trace} \int^{E_F} dE \beta \vartheta_Z G(r, r, E) \quad (6-7)$$

$$\mu_{orb} = -\frac{\mu_B}{\pi} \zeta \text{Trace} \int^{E_F} dE \int_V d^3r \beta l_Z G(r, r, E) \quad (6-8)$$

$$\mu_{spin} = -\frac{\mu_B}{\pi} \zeta \text{Trace} \int^{E_F} dE \int \beta \vartheta_Z G(r, r, E) \quad (6-9)$$

6.2. Detalles de Computo

Para iniciar un calculo con el código SPRKKR, primero se debe crear el pseudopotencial que va a modelar el sistema, el código lo hace automáticamente por medio de su interfaz gráfica llamada XBAND, donde se debe proporcionar inicialmente la información cristalográfica del material, grupo espacial, constante de red, ocupaciones en la red, contenido. así como los parámetros de computo, tales como los puntos K sobre la red, tolerancia, rangos de energía, métodos de solución del problema, el código cuenta con integración sobre las zonas de Brillouin o por matrices de rotación.

Al generar el archivo potencial de partida se ingresan implementa el método scf, el cual aplica el método de campos auto-consistentes (SCF) para obtener la función de onda que describe el sistema y así poder obtener propiedades estructurales, magnéticas y espectroscópicas del material.

Después de generado el archivo potencial, se procede a calcular propiedades magnéticas y estructurales del material a partir de dos funciones llamadas kkrigen y clugen las cuales calculan la DOS, Xas, espectros; donde la elección de alguna de las dos funciones depende del método de solución que se implemente.

En los cálculos realizados en este proyecto, se implemento el modo full-relativistic, ya que el sistema Co_xFe_{100-x} al ser magnético, sus propiedades se dan debido a las interacciones entre los espines del material, por lo que para sistemas magnéticos se recomienda trabajar en este modo ya que reduce el tiempo de computo y disminuye el error, debido a que no hay que recurrir a aproximaciones menos exactas presentadas en el modo no relativistic o el modo relativistic.

El modo full-relativistic utiliza la ecuación de Dirac, entregando de forma natural las interacciones debidas al espín, por lo que se reduce el tiempo de computo. Para simplificación de los cálculos y mejorar el tiempo de computo, se direcciono el espín hacia el eje z. Se aplicaron 2000 puntos k sobre la red, y se calculo la energía del sistema con una tolerancia de 1×10^{-7} eV y un máximo de 200 interacciones para la convergencia en los cálculos.

Las propiedades magnéticas se determinaron a partir del potencial calculado por el método de campos auto consistentes, donde para las interacciones magnéticas se implemento el Hamiltoniano de Heisenberg, obteniendo así las constantes de interacción y las temperaturas de Curie del sistema Co_xFe_{100-x} . En las propiedades estructurales, con el pseudopotencial calculado se implemento el método kkrigen del código SPRKKR, donde se determinaron las DOS evaluando la energía de fermi en el plano complejo, en el cual la convergencia depende del radio de energía establecido, que para los cálculos realizados fue de 0.01 Ry.

7 Resultados y Análisis

7.1. Relajación Estructural

En los resultados presentados a continuación se empleó el código SPR-KKR, en el cual se implemento en modo full-relativistic para generar el pseudopotencial de aproximación, donde se mantuvo constante la dirección z las interacciones debidas al espín, simplificando de esta forma los cálculos y reduciendo así el tiempo de computo.

Las constantes de red del sistema Co_xFe_{100-x} se calculó con para determinar los valores en los que el sistema presenta estabilidad, descartando de esta forma las constantes de red que hacen el sistema meta-estable. Se parte de datos experimentales de constantes de red, donde para la fase ordenada (Pm3m), se tomo de la base de datos material projects [7], que reporta para $Co_{50}Fe_{50}$ una constante de red de 2.843 Å. En la fase desordenada (Im3m) se tomo la constante de red reportada por T. Sourmail [4] de 2.856 Å para $Co_{50}Fe_{50}$.

A partir de las constante de red experimentales tomadas, se calculó la energía mínima del sistema para obtener los valores teóricos de la constante de red.

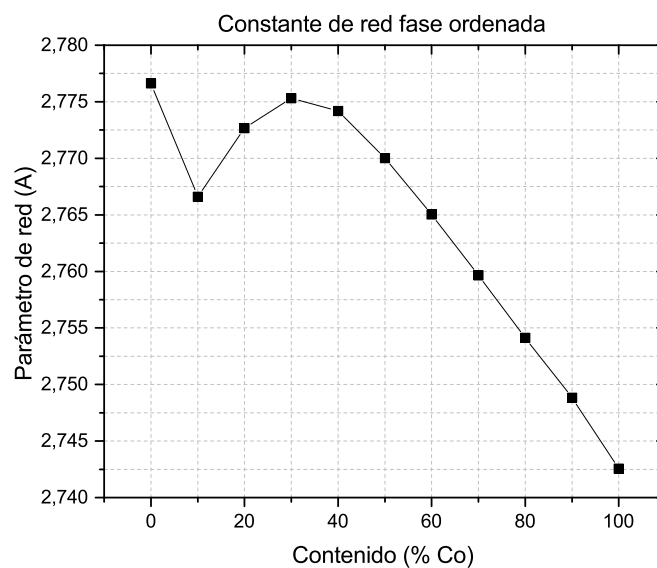
Se hizo una variación del 10 % del parámetro de red experimental (+/- 0,2843) Å para la fase ordenada y (+/- 0,2856) Å para la fase desordenada, la cual se dividió este rango en 30 puntos, donde para cada punto que fue dividida la constante de red se calcula su energía. Finalmente se hace una aproximación polinomial de cuarto grado para determinar el valor de mínima energía, el cual establece la constante de red teórica del sistema.

Los valores de constante de red obteniendo con variación del 10 % del valor experimental, se toman para determinar con mayor precisión el valor teórico, repitiendo todo el proceso de calculo, pero reduciendo el rango de variación, donde se calcula para una variación del 5 % y finalmente del 1 % , obteniendo así el valor teórico de la constante de red para $Co_{50}Fe_{50}$.

Se tomaron las constantes de red teóricas de ($Co_{50}Fe_{50}$) en ambas fases (ordenada y desordenada), para proceder a obtener las constantes de red teórica para todas las composiciones de Co_xFe_{100-x} (x=0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100) at % Co, pero en este caso variando la constante de red en +/- 1 % del valor teórico obtenido de la concentración anterior.

Tabla 7-1: Constante de red calculada fase ordenada (Pm3m)

Contenido (% Co)	Parámetro de red (Bohr)	Parámetro de red (Å)
0	5,247	2,776
10	5,228	2,766
20	5,239	2,772
30	5,244	2,775
40	5,242	2,774
50	5,234	2,770
60	5,225	2,765
70	5,214	2,759
80	5,204	2,754
90	5,194	2,748
100	5,182	2,742

**Figura 7-1:** Constante de red en función del contenido de Co fase ordenada

Los resultados obtenidos para Co_xFe_{100-x} en la fase ordenada Pm3m, sigue el comportamiento reportado por [2][6] para contenidos de Co mayores al 30 at % . En contenidos menores al 30 at % se observa una desviación en la tendencia de la constante de red, lo cual se debe a que para contenidos de (10 y 20) at % Co se producen problemas de estabilidad en la red, ya que para bajas concentraciones de Co el Fe es dominante dentro de la red. Como

se observa en la figura 3-2 el Fe presenta una simetría cubica $Im\bar{3}m$, por lo que el sistema difícilmente encuentra un punto de estabilidad a bajas concentraciones de Co para la fase ordenada, por lo que se ve reflejado en la desviación de la tendencia de la constante de red para altos contenidos de Fe.

Tabla 7-2: Constante de red calculada fase desordenada

Contenido (% Co)	Parámetro de red (Bohr)	Parámetro de red (Å)
0	5,263	2,785
10	5,260	2,783
20	5,239	2,772
30	5,244	2,775
40	5,242	2,774
50	5,235	2,770
60	5,225	2,765
70	5,214	2,759
80	5,204	2,753
90	5,194	2,748
100	5,196	2,749

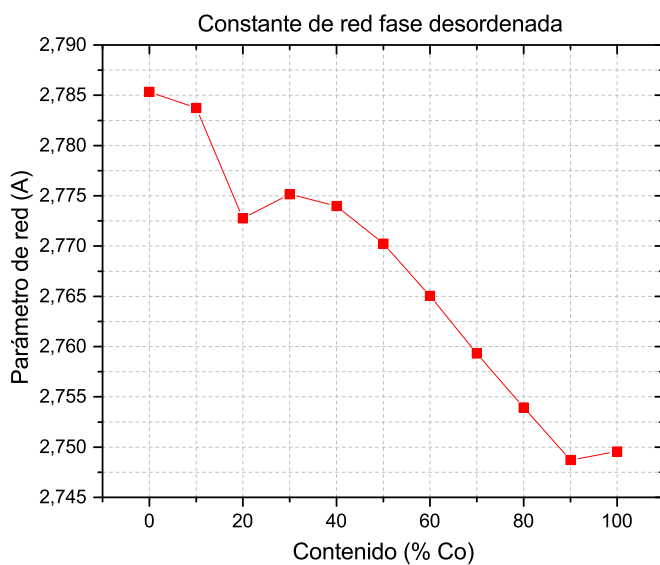


Figura 7-2: Constante de red en función del contenido de Co fase desordenada

En la fase desordenada ($\text{Im}\bar{3}\text{m}$) se observa que el sistema $\text{Co}_x\text{Fe}_{100-x}$ sigue el comportamiento reportado por Sundar [2], teniendo desviación en contenidos menores al 30 at % Co, lo cual se debe a un problema de precisión en el calculo producido por el polinomio de aproximación implementado, ya que los puntos de energía calculados presentaron un error del 20 % con respecto a la curva de aproximación, produciendo el comportamiento reportado en la figura 7-2.

En la figura 7-3 se observa las constantes de red reportadas por Sundar [2], donde la disminución del parámetro de red con el aumento del contenido de Co se debe a la diferencia de radios atómicos del Fe y el Co (Co - 1.35 Å y Fe - 1.4 Å), generando una distorsión en la red, que se evidencia con la caída del 2 % de la constante de red de 2,7853 Å a 2,7496 Å para $\text{Co}_{10}\text{Fe}_{90}$ y $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$ respectivamente.

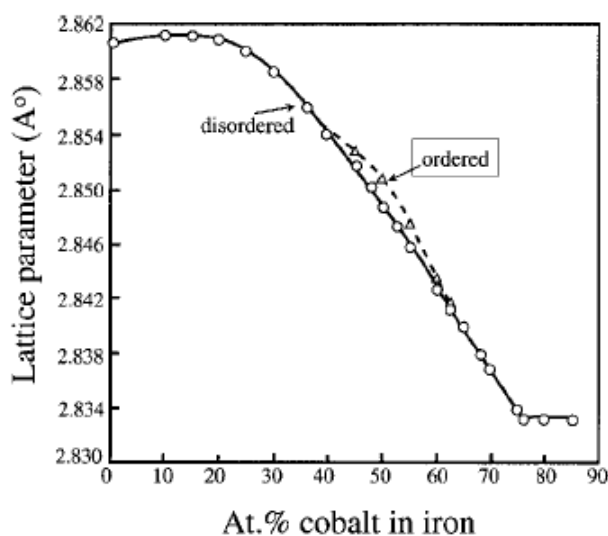


Figura 7-3: Constante de red vs variación contenido de Co.

7.2. Difracción de RX

En la figura 7-4 y 7-5 se observa la difracción de rayos X teórica para las fases ordenada (Pm3m) y desordenada (Im3m) del sistema Co_XFe_{100-X} , la cual se determinó para cada una de las constantes de red calculadas por primeros principios.

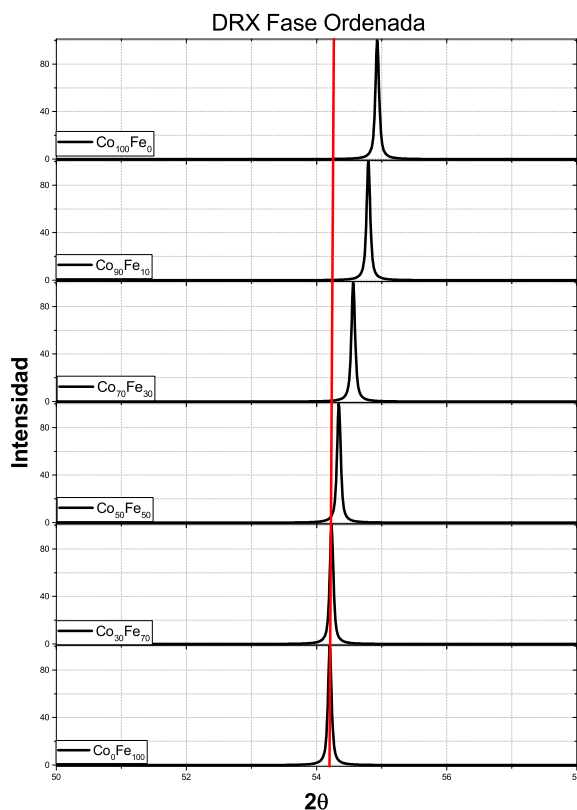


Figura 7-4: DRX Teórica fase ordenada

Se encontró un desplazamiento del pico principal hacia la derecha para la fase ordenada, lo cual se debe a que la red es deformada, debido a la diferencia de radios atómicos del Co y el Fe (1.25 Å y 1.26 Å respectivamente). En la figura 7-4 se observa que para concentraciones superiores al 30 % de Co, la diferencia de contenido de átomos de Fe y Co empieza a ser notoria, por lo que se genera el desplazamiento del pico principal, que es causado por el corrimiento de los planos en la red.

El comportamiento encontrado para la fase ordenada, descarta la hipótesis planteada por F. Sánchez [3], donde predice que el corrimiento se debe a las deformaciones causadas por las micro tensiones presentadas en el proceso de aleado mecánico, y no a la diferencia de radios atómicos del Co y Fe.

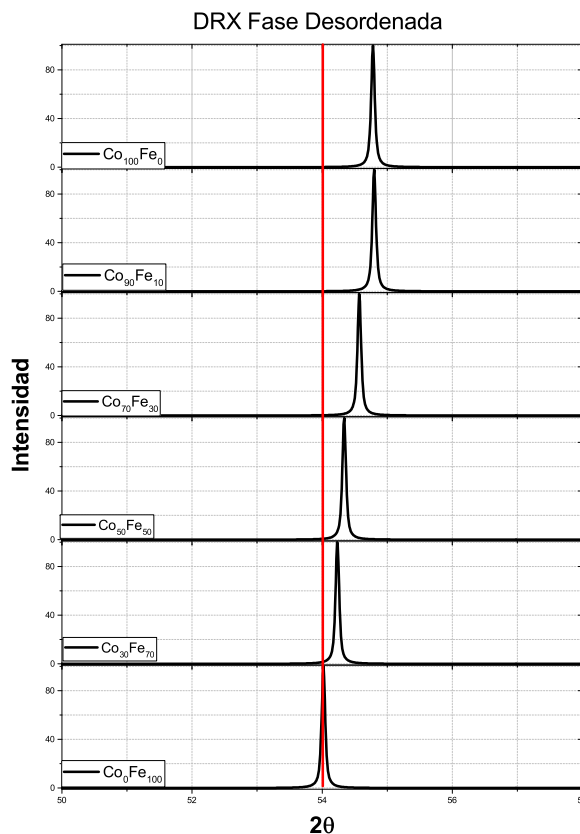


Figura 7-5: DRX Teórica fase desordenada

Para la fase desordenada se encontró un comportamiento similar al presentado en la fase ordenada. Se encontró que el pico principal se desplaza hacia la derecha debido a la diferencia de radios atómicos del Co y Fe en el sistema, y a las deformaciones producidas por la interacción entre átomos vecinos, ya que al estar desordenada la red se presenta una mayor distorsión, produciendo que el desplazamiento del pico principal se perciba desde bajas concentraciones de Co, como se observa en la figura 7-5.

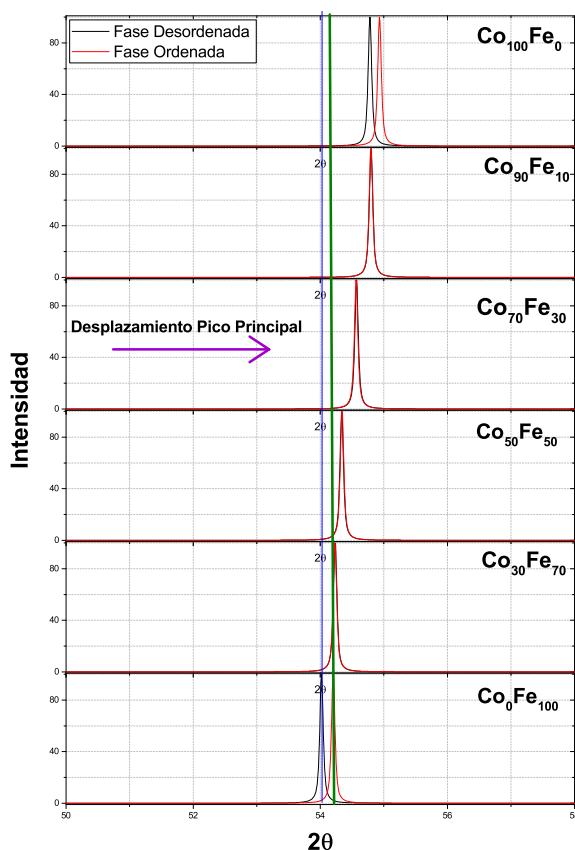


Figura 7-6: DRX Teórica fase desordenada

En la figura 7-6 se observa el comportamiento de ambas fases (ordenada y desordenada), donde cabe notar que desde 30 at % Co hasta 90 at % Co, ambas fases se sitúan en los mismo planos, lo que confirma que el sistema CoFe conserva la estructura BCC del Fe puro.

Se confirma en la figura 7-6, que el desorden presentado en el sistema CoFe no es de tipo estructural sino de tipo sustitucional o químico, el cuál es debido al intercambio de los átomos en sus posiciones, donde el contenido químico promedio de cada posición es igual, lo que lleva a que el patrón de difracción sea igual en ambas fases y que el corrimiento en el pico principal sea solo debido al cambio en el contenido de Co.

7.3. Convex-Hull

Las constantes de red calculadas en cada fase (ordenada, desordenada) dan valores candidatos de parámetro de red, que deben ser sometidos a pruebas de estabilidad. Con el cálculo de la estabilidad del sistema se puede determinar cuál es la fase que presenta la energía mas baja entre las fases candidatas en las composiciones calculadas.

El análisis de estabilidad en las fases calculadas se puede realizar utilizando la construcción Convex Hull, la cual evalúa las energías de todo el sistema a partir de los precursores en su estado puro, en este caso Co y Fe.

Para el calculo del Convex Hull se implemento la ecuación 7-1 y 7-2, la cual evalúa la energía calculada del sistema Co_XFe_{100-X} .

$$\Delta H = E((Ap)(Bp)) - (1 - x)(E(A)) - x(E(B)) \quad (7-1)$$

$$x = \frac{q}{(p + q)} \quad (7-2)$$

Donde:

ΔH = Convex-Hull

$E(Ap * Bp)$ =Energía del contenido

$E(A)$ = Energia del Fe

$E(B)$ = Energía del Co.

Se calculó el Convex Hull para cada una de las fases (ordenada y desordenada), determinando la estabilidad del sistema Co_XFe_{100-X} , descartando o confirmando que contenidos y que fases son mas probables de encontrar y formar en estudios experimentales.

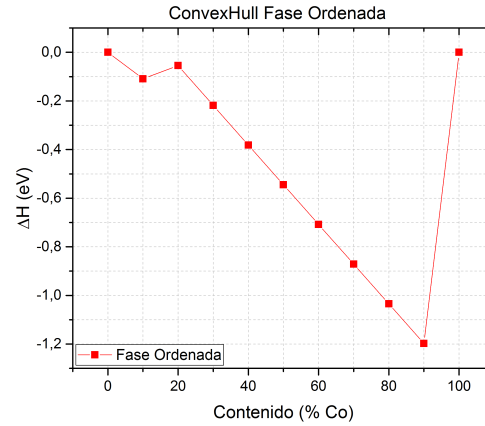


Figura 7-7: Convex Hull fase ordenada

Se encontró para la fase ordenada que para todos los contenidos de Co, el sistema presenta estabilidad como se observa en la figura 7-7, ya que todas las energías del sistema están por debajo de 0. Se identifica que para $Co_{90}Fe_{10}$ se presenta la mayor estabilidad del sistema.

En la fase desordenada se encontró que no es estable el sistema Co_XFe_{100-X} para contenidos menores al 30 at %Co, confirmando así la desviación reportada en el cálculo de las constantes de red para estos contenidos. Se encontró que para contenidos mayores al 30 at % Co el sistema Co_XFe_{100-X} es estable, presentando la mayor estabilidad para $Co_{90}Fe_{10}$.

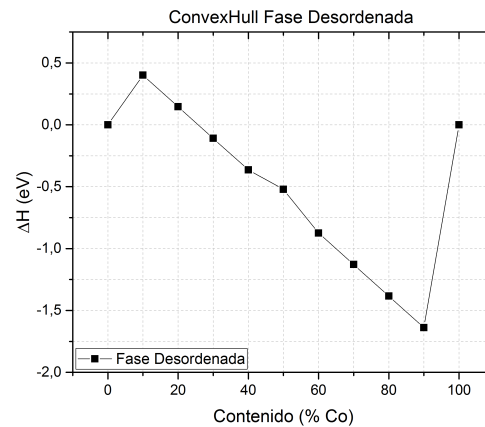


Figura 7-8: Convex Hull fase desordenada

Se encontró, como se observa en la figura 7-9, que para contenidos menores al 50 at % Co, es mas probable encontrar el sistema en la fase ordenada (Pm3m), y para contenidos mayores al 40 at % Co la fase desordenada es la que presenta mayor estabilidad, siendo mas probable encontrarla dentro de estos contenidos, confirmando lo reportado por T. Sourmail [4].

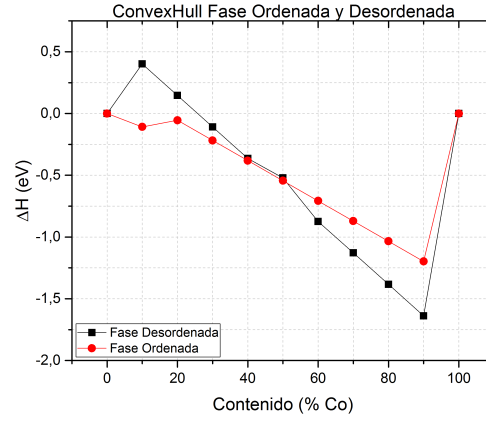


Figura 7-9: Convex Hull Co_xFe_{100-x}

7.4. Momentos Magnéticos

Se calcularon los momentos magnéticos del sistema Co_XFe_{100-X} para las fases ordenada y desordenada en modo full relativistic, donde se desprecia el momento magnético orbital ya que en metales de transición debido a las fuertes perturbaciones del nivel d, el aporte de los momentos magnéticos debidos a la órbita de los electrones son casi despreciables, con valores de $0.1 \mu_B$ y $0.2 \mu_B$, como reporta J.MacLaren [4].

Tabla 7-3: Momentos magnéticos locales fase ordenada

Contenido (% Co)	Momento Magnético Fe (μ_B)	Momento Magnético Co (μ_B)
0	2,069	0
10	2,229	1,786
20	2,359	1,816
30	2,452	1,829
40	2,527	1,829
50	2,505	1,799
60	2,519	1,784
70	2,526	1,770
80	2,535	1,759
90	3,535	1,746
100	0	1,705

Los momentos magnéticos debidos al espín, se calcularon con 2000 puntos k sobre la red, y con una tolerancia de convergencia del 0.000001, en el cual se encontró para el sistema ordenado un incremento de los momento magnético locales del Fe, pasando de $2.069 \mu_B$ a $3.535 \mu_B$, lo cual confirma lo reportado por M. Lezaic [5].

Se encontró que el incremento de los momentos magnéticos del Fe con el aumento del contenido de Co se debe a que el Fe al tiene más electrones desapareados en el nivel d, donde se evidencia que con el incremento del contenido de Co disminuye el apantallamiento producido por las interacciones Fe-Fe, generando estados libres que incrementan el momento magnético del Fe.

El Co presenta menor cantidad de electrones libres en el nivel d que el Fe, por lo que al generarse las bandas de energía del sistema, los estados libres del Fe interactuan con los del Co, produciendo un apantallamiento que hace que los momentos magnéticos del Co permanezca aproximadamente constante, donde se encontró un incrementando de los momentos

magnéticos del Co de $1.786 \mu_B$ a $1.799 \mu_B$ hasta el 50 % de Co y para concentraciones mayores disminuye hasta $1.7055 \mu_B$.

Tabla 7-4: Momentos magnéticos locales fase desordenada

Contenido (% Co)	Momento Magnético Fe (μ_B)	Momento Magnético Co (μ_B)
0	2,088	0
10	2,235	1,789
20	2,355	1,815
30	2,450	1,828
40	2,497	1,822
50	2,510	1,801
60	2,521	1,783
70	2,517	1,766
80	2,537	1,763
90	3,528	1,748
100	0	1,713

Como se observa en la tabla 7-4, para el sistema desordenado se presenta un comportamiento similar al de la fase ordenada, en el cual el Fe tiene un incremento en el momento magnético de $2.087 \mu_B$ a $3.5277 \mu_B$ y para el Co un incremento de $1,789 \mu_B$ a $1.800 \mu_B$ hasta el 50 % de Co y una disminución hasta $1,7131 \mu_B$ para concentraciones mayores de Co.

Se encontró que para la fase desordenada los momentos magnéticos del Fe son ligeramente mayores que para la fase ordenada, como se observa en las tablas 7-3 y 7-4, lo cual se debe a las interacciones y al apantallamiento generado por los átomos vecinos en cada una de las fases.

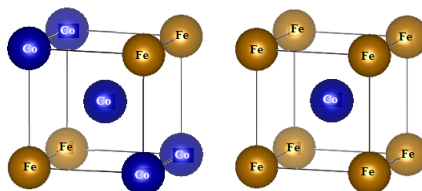


Figura 7-10: Sistema Co_xFe_{100-x}

El comportamiento de los momentos magnéticos del sistema Co_XFe_{100-X} dependen de la interacción con los átomos vecinos y del ordenamiento de la red como se observa en la figura 7-10, generando así en algunas zonas de la red un apantallamiento del momento magnético haciendo que disminuya o aumente el momento magnético neto del sistema, ya que cualquier tipo de perturbación en la red implica un costo en las propiedades magnéticas, como se observa el comportamiento mostrado en la figura 7-11 para las fases ordenada y desordenada.

Tabla 7-5: Momentos magnético total Co_XFe_{100-X}

Contenido (% Co)	Momento Magnético Fe (μ_B)	Momento Magnético Co (μ_B)
0	2,069	2,088
10	2,369	2,190
20	2,502	2,247
30	2,530	2,263
40	2,496	2,227
50	2,305	2,156
60	2,157	2,078
70	1,994	1,991
80	1,829	1,918
90	1,649	1,827
100	1,705	1,713

El momento magnético neto de cada una de las fases estudiadas (ordenada y desordenada) muestran el comportamiento reportado por Sanchez [3], Sundar [2] y T.sourmail[5], donde se identifica un aumento del momento magnético neto con el incremento del porcentaje de Co, con un valor máximo de $2.53\mu_B$ y de $2.263 \mu_B$ para la fase ordenada y desordenada respectivamente en $Co_{30}Fe_{70}$. El valor máximo del momento magnético neto para $Co_{30}Fe_{70}$ en las fases ordenada y desordenada se debe a que para 30 % de Co aumenta la banda de anti-enlace, debido a la diferencia electrónica del Fe y Co en el nivel d de energía.

Se encontró que cuando el contenido de Co es > 30 at % Co, se empieza a generar una mayor cantidad de estados en la banda de enlace, provocando que empiece a haber una disminución del momento magnético neto del sistema Co_XFe_{100-X} debido al apantallamiento generado al aparearse las bandas de energías del Co y Fe, por lo que es incrementada la cantidad de estados donde el espín es anti-paralelo, causando el decaimiento del momento magnético neto del sistema .

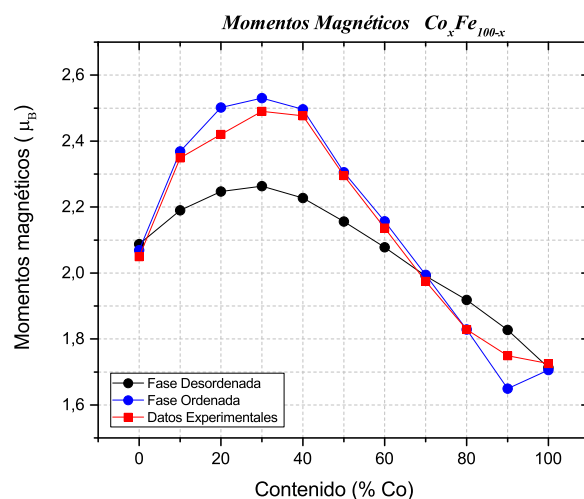


Figura 7-11: Momento magnético total Co_xFe_{100-x}

Los momentos magnéticos obtenidos por primeros principios en las fases ordenada y desordenada sigue el comportamiento de la curva de Slater-Pauli como se observa en la figuras 7-11 y 7-12.

El sistema ordenado y desordenado sigue la tendencia esperada de los momentos magnéticos locales y netos, determinando que la mejor respuesta magnética del sistema para la fase ordenada y desordenada es para $Co_{30}Fe_{70}$, con valores de $2,263 \mu_B$ y $2,53 \mu_B$ respectivamente, donde se observa que la mejor respuesta magnética es para la fase ordenada.

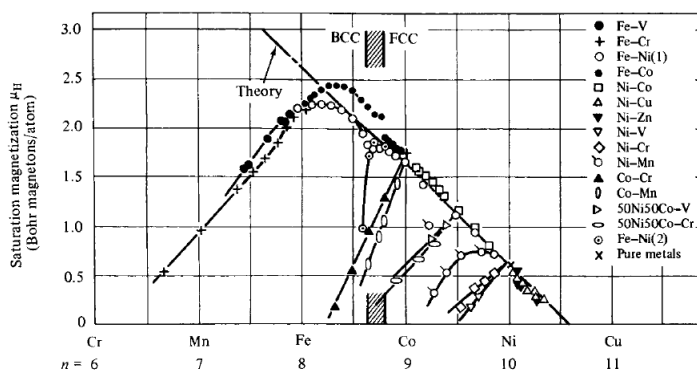


Figura 7-12: Curva de Slater-Pauli Co_xFe_{100-x} [11]

7.5. Densidades de Estado

El cálculo de las densidades de estado se realizó aplicando 2000 puntos K sobre la red en modo full relativistic, en un intervalo de energía de -10 eV a 10 eV, donde se centro la energía de Fermi en 0 eV. La densidad de estados para las fases ordenada y desordenada fue calculada a partir del pseudopotencial calculado por primeros principios por el método KKR.

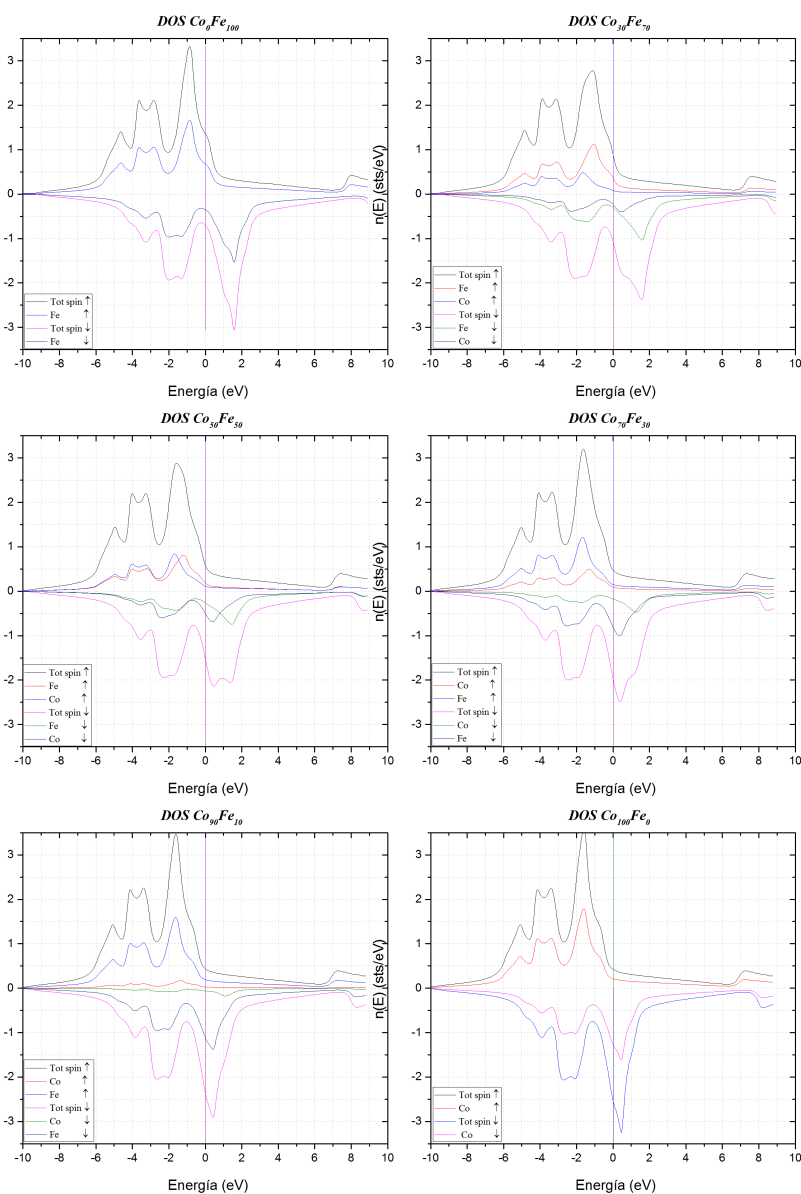


Figura 7-13: DOS fase ordenada Co_xFe_{100-x}

Se encontró para la fase ordenada que el pico principal para espín up se encuentra por debajo de la energía de Fermi para todas las composiciones, lo que indica que se llenan todos los estados libres del Fe con el incremento del Co, debido a que el Co es mucho mas electronegativo que el Fe.

Las energías de enlace, generan que no queden estados libres en espín up por lo que al quedar completamente llenos, empiezan a ser llenado los estados para espín down. Se observa un desplazamiento del pico principal para espín down hacia valores mayores a la energía de Fermi, indicando que quedan estados libres en el sistema, o electrones desapareados, produciendo ferromagnetismo en el material.

Se observa en la figura 7-13, que al incrementar el contenido de Co los estados del Fe y los estados del Co para espín up y espín down, se alejan entre si, lo cual se debe a los cambios de contenido de ambos materiales (Fe, Co) en la red, lo cual es corresponde con lo reportado por J.Maclaren [8].

El sistema Co_xFe_{100-x} presenta un mayor comportamiento ferromagnético para $Co_{30}Fe_{70}$, como se observa en la figura 7-13, donde para contenidos de Co $0 \leq x \leq 30$ el pico principal para spin down se aleja de la energía de Fermi, incrementando el numero de estados libres, y para concentraciones entre $40 \leq x \leq 100$ el pico principal para espín down se corre de nuevo hacia la energía de fermi, haciendo que el ferromagnetismo sea más débil.

La fase desordenada presenta un comportamiento similar al de la fase ordenada, donde se encontró que en la fase ordenada, para concentraciones superiores al 50 at % Co el pico principal para espín down se encuentra sobre la energía de Fermi, lo que representa un menor numero de estados libres en el sistema, haciendo que sea magneticamente mas debil.

El comportamiento observado para la fase desordenada, se debe a que al estar desordenado el sistema existe un mayor numero de estados de enlace para espín down, generando que se encuentre un menor numero de estados libres, afectando el comportamiento ferromagnético del sistema Co_xFe_{100-x} .

Se observa en la figura 7-14, que en $Co_{30}Fe_{70}$ se presenta el mayor aporte ferromagnético, ya que para este contenido en espín down el pico principal se encuentra mas alejado de la energía de Fermi, encontrando la mayor cantidad de estados libres para todo el contenido de Co.

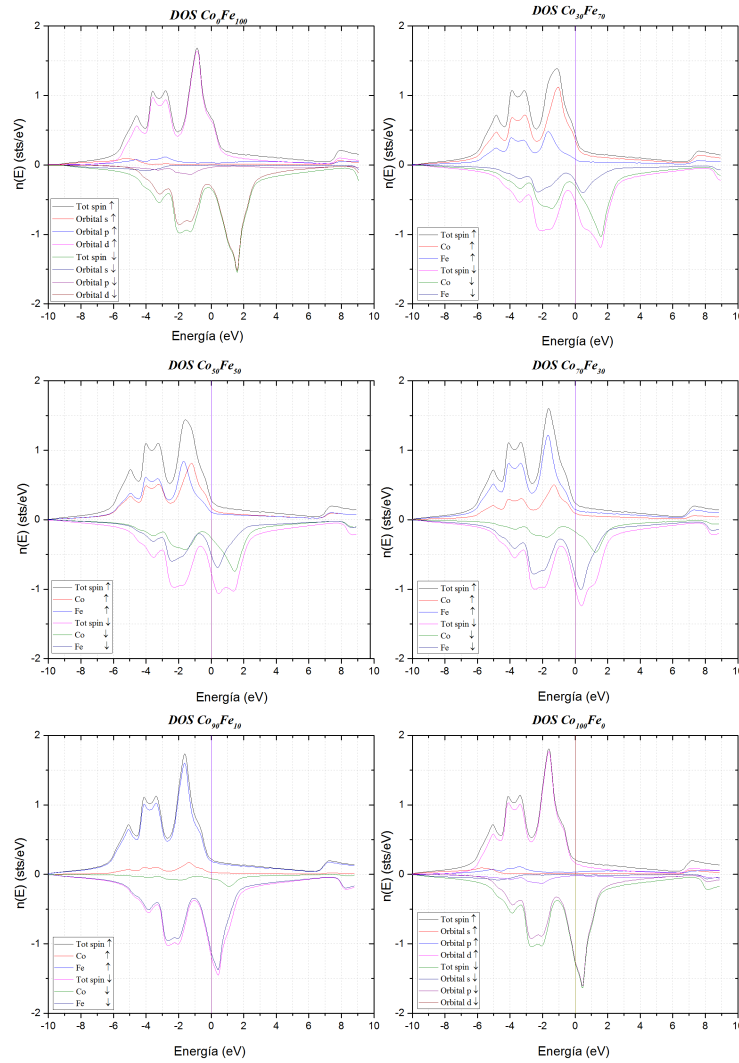


Figura 7-14: DOS fase desordenada Co_xFe_{100-x}

Se encontró que debido al desorden presentado en la red, para contenidos inferiores al 50 at% Co el elemento precursor que mayor aporta a la densidad de estados total es el Co, y para contenidos mayores al 50 at% Co el aporte mayoritario se debe a los átomos de Fe, por lo que se observa el comportamiento presentado por el pico principal para espín down, donde el pico principal presenta un corrimiento hacia la energía de Fermi.

7.6. Constantes de Intercambio

El cálculo de las constantes de intercambio se calculó a partir del Hamiltoniano de Heisenberg **eq. 4-2** y el formalismo de Lichtenstein [25], con un radio de restricción esférico de 4.7 a.u y 2000 puntos K sobre la red.

Tabla 7-6: Constantes de intercambio Co_xFe_{100-x}

Contenido (% Co)	Fase ordenada J_{ij} (meV)	Fase desordenada J_{ij} (meV)
0	0,152	0,151
10	0,167	0,169
20	0,187	0,182
30	0,208	0,228
40	0,219	0,220
50	0,224	0,224
60	0,222	0,221
70	0,217	0,208
80	0,209	0,207
90	0,202	0,199
100	0,194	0,194

En la tabla 7-6 se observa que el sistema Co_xFe_{100-x} en las fases ordenada y desordenada presenta ferromagnetismo, ya que $J_0 \geq 0$; si el sistema presentara un $J_0 < 0$, el sistema sería paramagnético.

Se observa en la figura 7-15, un crecimiento de la constante de intercambio en función de la composición de Co, donde para $Co_{50}Fe_{50}$ presenta los valores más altos con una energía de 0,22369 meV y 0,22425 meV para la fase ordenada y desordenada respectivamente, lo cual indica que se presenta un mayor ferromagnetismo para 50 at % Co.

Se toma en consideración los resultados mostrados en la interacción con respecto a los primeros vecinos, y la interacción con respecto a los segundos y terceros vecinos son mostrados en la figura 7-16, donde se observa que para los terceros vecinos se genera anti-ferromagnetismo en el material.

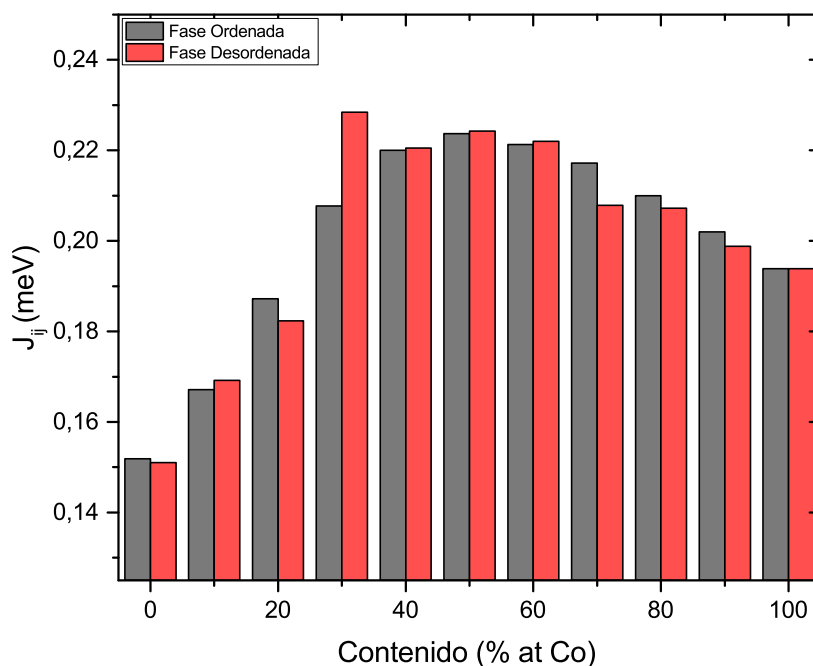


Figura 7-15: Constante de interacción fase ordenada y desordenada Co_XFe_{100-X} calculada

Se encontró para la fase ordenada, que las interacciones Fe-Co son las mas significativas, ya que la energía de intercambio es generada por la interacción de espines entre átomos vecinos, por lo que es de esperarse que el Fe interactue con un mayor numero de vecinos, haciendo que su constante de interacción sea mayor que la generada por la interacción Co-Fe.

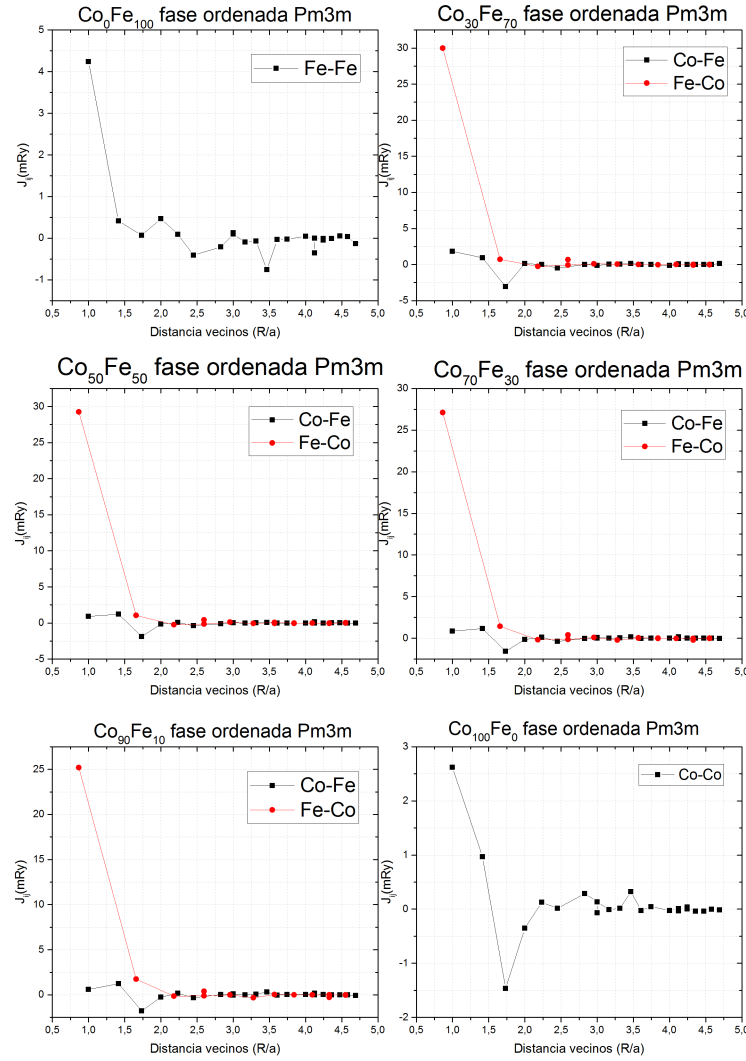


Figura 7-16: Constantes de intercambio fase ordenada Co_xFe_{100-x}

Se encontró para la fase desordenada que las constantes de interacción mas significativas son producidas por las interacciones Fe-Co y que las interacciones Co-Fe a pesar de seguir siendo inferiores a las interacciones Fe-Co, son mucho mas significativas que para la fase ordenada; esto se debe a que el desordenamiento en el sistema incrementa el numero de interacciones, haciendo que la energía de intercambio aumente.

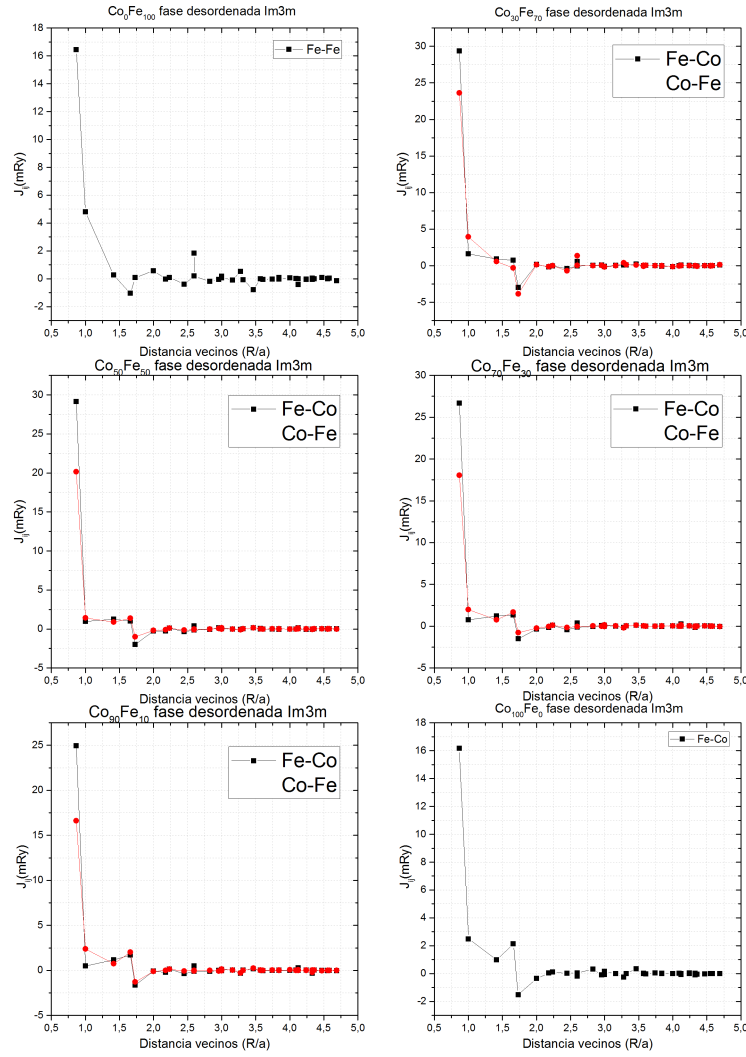


Figura 7-17: Constantes de intercambio fase desordenada Co_xFe_{100-x}

7.7. Temperaturas de Curie

Se calculó la temperatura de Curie a partir de las constantes de intercambio obtenidas por primeros principios para los primeros vecinos del sistema Co_XFe_{100-X} mostrados en la tabla 7-7 para las fases ordenada y desordenada, la cual se obtuvo a partir de la **eq. 7-3** propuesta por Lezaic[5].

$$T_C = \frac{2}{3} \frac{J_0}{K_B} \quad (7-3)$$

Donde:

T_C = Temperatura de Curie

J_0 = Constante de intercambio

K_B = Constante de Boltzman 0,000086173324 eV

Tabla 7-7: Temperatura de Curie sistema Co_XFe_{100-X}

Contenido (% Co)	Tc fase ordenada (K)	Tc fase desordenada (K)
0	1171,93	1168,46
10	1292,92	1308,88
20	1448,21	1410,77
30	1606,90	1767,29
40	1701,93	1706,21
50	1730,53	1734,91
60	1711,87	1717,28
70	1680,25	1607,84
80	1624,45	1603,04
90	1562,74	1538,29
100	1499,57	1499,73

Se encontró concordancia con los resultados reportados por Lezaic [5], T.Sourmail [4], M. Rahaman [6], los cuales reportan temperaturas de Curie mayores a 1403 K para el sistema Co_XFe_{100-X} , . Lezaic [5] asocia la temperatura de curie con la interacción de primeros vecinos de la red, reportando temperaturas de hasta 1700 K, las cuales son muy próximas a la máxima obtenida de 1711 K para la fase ordenada.

En los resultados obtenidos para la fase desordenada, se encontró poca información en la literatura debido a que en la fase ordenada es donde se presenta el mayor ferromagnetismo

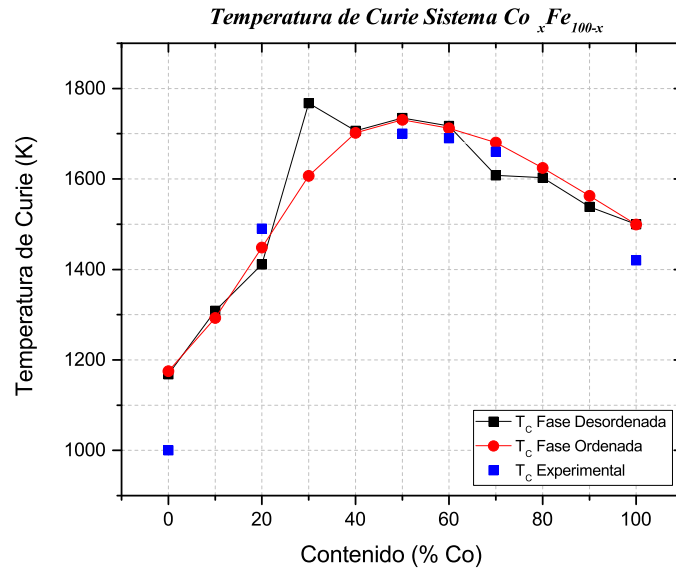


Figura 7-18: Temperatura de Curie en función del contenido de Co

y lo que se busca es equilibrio en las propiedades magnéticas del material, de igual forma se reporta el resultado obtenido de 1767.3 K el cual puede ser implementado en aplicaciones donde no se necesite altas magnetizaciones, pero si altas temperaturas de Curie.

Se observa en la figura 7-18 que a pesar de que la fase ordenada presente un mayor ferromagnetismo, para $Co_{30}Fe_{70}$ en la fase desordenada el sistema presenta la mayor temperatura de Curie entre las dos fases 1767.3 K.

Se encontró que para los contenidos de 40, 50 y 60 at% de Co la temperatura de Curie es casi igual en ambas fases, lo que se debe a que al estar casi en la misma proporción los contenidos en ambas fases ordenada y desordenada, las constantes de interacción sean muy similares, entregando temperaturas de Curie casi iguales en estos contenidos.

8 Conclusiones

* Se confirmo en el DRX y la relajación estructural, que la disminución del parámetro de red es debido a las diferencia de radios atómicos del Fe y Co, y no al método de obtención de la aleación CoFe.

* Se encontró para la fase ordenada que a pesar de no encontrar los valores esperados del parámetro de red para contenidos menores al 30 % Co, el sistema puede encontrarse con los valores calculados ya que se comprobó su estabilidad como se observa en el Convex-Hull calculado.

* Se determino que en ambas fases (ordenada y desordenada) el sistema que el sistema Co_xFe_{100-x} sigue el comportamiento de la curva de Slater- Pauli y presenta los momentos magnéticos netos mas fuertes en $Co_{30}Fe_{70}$

* La DOS y las constantes de intercambio confirmaron el comportamiento ferromagnético del sistema CoFe en las fases ordenada y desordenada, donde para $Co_{30}Fe_{70}$ el sistema presento el mejor comportamiento ferromagnético.

* Se determino que el sistema desordenado $Co_{30}Fe_{70}$ presento el valor mas alto de Temperatura de Curie de 1767 K, y en la fase desordenada para $Co_{50}Fe_{50}$ con un valor de 1754 K, donde a pesar de tener el mayor valor de temperatura de Curie para el sistema desordenado, el sistema ordenado fue el que presento mejor comportamiento ferromagnético.

9 Participación en eventos

* Ponencia con el trabajo “Simulación de propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Fe96-xCoxC por primeros principios” en el sexto encuentro departamental de semilleros de investigación de Risaralda, 11 de mayo de 2016, CIDCA.

* Poster con el trabajo “Simulación de propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Fe100-xCox por primeros principios” V congreso nacional de ingeniería física, Universidad Nacional de Colombia y Universidad de Eafit, del 26 al 30 de septiembre de 2016.

* Ponente con el trabajo “Simulación de propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Fe96-xCoxC por primeros principios” en el vi encuentro regional de semilleros de investigación, 26 y 27 de octubre de 2016, RREDSI.

* Ponente con el trabajo “Simulación de propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Fe96-xCoxC por primeros principios” en el V encuentro nacional de experiencias significativas en investigación formativa y I encuentro de estudiantes de movilidad del programa DELFIN, 26 y 27 de octubre de 2016, RREDSI.

10 Bibliografía

- [1] K. Kim, S. Lee and D. Lynch, "Study of optical properties and electronic structure of ferromagnetic FeCo", Solid State Communications, vol. 114, no. 9, pp. 457-460, 2000.
- [2] Mizuno, M., Araki, H. and Shirai, Y. (2006). First Principles Calculation of Defect and Magnetic Structures in FeCo. MATERIALS TRANSACTIONS, 47(11), pp.2646-2650.
- [3] F. Sánchez-De Jesús, A. Bolarín-Miró, C. Cortés Escobedo, G. Torres-Villaseñor and P. Vera-Serna, "Structural Analysis and Magnetic Properties of FeCo Alloys Obtained by Mechanical Alloying", Journal of Metallurgy, vol. 2016, pp. 1-8, 2016.
- [4] T. SOURMAIL, "Near equiatomic FeCo alloys: Constitution, mechanical and magnetic properties", Progress in Materials Science, vol. 50, no. 7, pp. 816-880, 2005.
- [5] M. Lezaic, P. Mavropoulos and S. Blügel, "First-principles prediction of high Curie temperature for ferromagnetic bcc-Co and bcc-FeCo alloys and its relevance to tunneling magnetoresistance", Applied Physics Letters, vol. 90, no. 8, p. 082504, 2007.
- [6] M. Rahaman, A. Ruban, A. Mookerjee and B. Johansson, "Magnetic state effect upon the order-disorder phase transition in Fe-Co alloys: A first-principles study", Physical Review B, vol. 83, no. 5, 2011.
- [8] P. Söderlind, B. Johansson and O. Eriksson, "Spin and orbital magnetism in Fe₃Co and Co₃Ni alloys", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, vol. 104-107, pp. 2037-2039, 1992.
- [9] W. Lu, P. Huang, C. He and B. Yan, "Compositional and Structural Analysis of FeCo Films Electrodeposited at Different Temperatures", International Journal of ELECTROCHEMICAL SCIENCE, vol. 7, pp. 12262 - 12269, 2012.

- [10] C. Neise, H. Eschrig, H. Eschrig and H. Ebert, *Magnetic Properties Studied by Density Functional Calculations Including Orbital Polarisation Corrections*. Dresden: Saechsische Landesbibliothek- Staats- und Universitaetsbibliothek Dresden, 2011.
- [11] B. Cullity and C. Graham, *Introduction to Magnetic Materials*. Somerset: Wiley, 2011.
- [12] "Hierro - Propiedades del Hierro", Elementos.org.es. [Online]. Available: <http://elementos.org.es/hierro>. [Accessed: 19- Feb- 2016].
- [13] "Cobalto - Propiedades del cobalto", Elementos.org.es. [Online]. Available: <http://elementos.org.es/cobalto>. [Accessed: 19- Feb- 2016].
- [14] H. Wang, P. Ma and C. Woo, ".^{Ex}change interaction function for spin-lattice coupling in bcc iron", *Physical Review B*, vol. 82, no. 14, 2010.
- [15] mp 54. Co (hexagonal, P63 mmc, 194), Materialsproject.org, 2017. [Online]. Available: <https://materialsproject.org/materials/mp-54/>. [Accessed. 01 Nov 2017].
- [16] D. Carta, G. Mountjoy, M. Gass, G. Navarra, M. Casula and A. Corrias, "Structural characterization study of FeCo alloy nanoparticles in a highly porous aerogel silica matrix", *The Journal of Chemical Physics*, vol. 127, no. 20, p. 204705, 2007
- [17] P. Paluskar, J. Attema, G. de Wijs, S. Fiddy, E. Snoeck, J. Kohlhepp, H. Swagten, R. de Groot and B. Koopmans, "Spin Tunneling in Junctions with Disordered Ferromagnets", *Physical Review Letters*, vol. 100, no. 5, 2008.
- [18] A. Jakobsson, E. Şaşıoğlu, P. Mavropoulos, M. Ležaić, B. Sanyal, G. Bihlmayer and S. Blügel, "Tuning the Curie temperature of FeCo compounds by tetragonal distortion", *Applied Physics Letters*, vol. 103, no. 10, p. 102404, 2013.
- [19] A. Soler and B. Muñoz, "Comportamiento estructural y magnético del sistema FECO obtenido mediante aleamiento mecánico", *Scientia Et Technica*, vol. 1, no. 52, pp. 174-182, 2012.
- [20] H. Okamoto, "Co-Fe (Cobalt-Iron)", *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, vol. 29, no. 4, pp. 383-384, 2008.
- [21] "Simulación Computacional a Alta Presión (I)", personales.unican.es/. [Online]. Available: <http://personales.unican.es/junqueraj/Altas-presiones.pdf>. [Accessed: 22- Feb- 2016].

- [22] [1]W. Heisenberg, "Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik", Zeitschrift für Physik, vol. 38, no. 6-7, pp. 411-426, 1926.
- [23] [1]W. Heisenberg, "Zur Theorie des Ferromagnetismus", Zeitschrift für Physik, vol. 49, no. 9-10, pp. 619-636, 1928.
- [24]L. Alvarez Thon, Física Atómica y Molecular, 2nd ed. Santiago de Chile: Universidad Andrés Bello, 2015, pp. 53-80.
- [25] H. Ebert, A spin polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker (SPR-KKR) code for Calculating Solid State Properties. Munchen: Universit at Munchen, 2012.
- [26] H. Ebert, Xband. Munchen: Universit at Munchen, 2012.
- [27] M. Herrera Cabrera, Estudio desde primeros principios de propiedades electrónicas y estructurales de compuestos binarios y ternarios. La Laguna: Servicio de Publicaciones, Universidad de La Laguna, 2006.